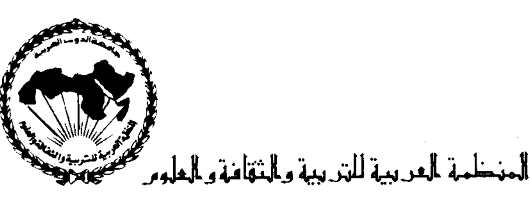
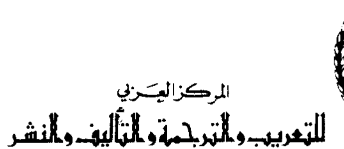








تأليف

ر. ديكه و ج. ويتكه

ترجمة
الدكتور
آحو يوسف

مراجعة وتدقيق
الدكتور المهندس
محمد علي سلامه

دمشق - ج.ع.س

1993

Introduction to

QUANTUM MECHANICS

by

R. H. DICKE and J. P. WITTKE

المدخل إلى ميكانيك الكم ـ الطبعة الأولى

المترجم: د. آخو يوسف

المركز العربي للتعريب والترجمة والتأليف والنشر بدمشق.

دمشق - ص.ب: 3752 ج.ع.س.

ع /1/10/1993

التنضيد والتنفيذ: دار الينابيع للنشر والتوزيع. دمشق

هاتف: ٤٢٨٤٦٨ ـ ٣٣٢٤٩١٤ ص.ب ٦٣٤٨

تصدير

نهجنا في المركز العربي للتعريب والترجمة والتأليف والنشر أن نركز على إصدار الكتب العلمية تأليفا وترجمة لافتقار المكتبة العربية الشديد إلى هذه المؤلفات العلمية، ويتم اختيار هذه الكتب لتعالج موضوعات متقدمة جدا في العلوم التطبيقية وذلك لأهميتها القصوى لمجتمعنا العربي من ناحية ولنبرهن من ناحية ثانية لكل ذي بصيرة من علمائنا المتخصصين العرب والأجانب أن اللغة العربية لغة عالمية كسائر اللغات الراقية تستطيع بكل جدارة واقتدار ان تستوعب العلوم مهما كانت متقدمة وحديثة إذا صح العزم وصدقت النية، وثالثا لأننا نؤمن أن التدريس والتعليم الجامعي وما فوق الجامعي باللغة العربية مهمة تربوية نبيلة.

واليوم نقدم لزملائنا أولا ولأبنائنا ثانيا ترجمة هذا الكتاب بعنوان "المدخل إلى ميكانيك الكم" للمؤلفين ديكه وويتكه وهو مرجع أساسي لطلاب الفيزياء الحديثة في مختلف تخصصات العلوم الالكترونية والميكروية، والحالات الصلبة، ولأولئك الراغبين في دراسة الليزر وتطبيقاته المختلفة، ويعد هذا الكتاب أيضا مدخلا أساسيا لعلوم الالكترونيات الكمومية.

كما يمكن طلاب المرحلة الأولى من الدراسات الجامعية العليا في العلوم التطبيقية والهندسية الميكروية والالكترونية والفيزياء النووية، الافادة من هذا الكتاب كتابا منهجيا.

ويتألف الكتاب من ثلاثة أجزاء رئيسية هي:

- **الجزء الأول:** ويشمل الفصول الثلاثة الأولى:

وتعطي هذه الفصول تفسيرا للظواهر ذات المقاييس الذرية وفي فيزياء

الحالات الصلبة، التي عجزت الظواهر الكلاسيكية عن تفسيرها، كما يبين ويفسر المشاهدات التجريبية مثل العبور النفقي وسلوكيات الجسيمات وتكمية الطاقة.

- **الجزء الثاني:** ويشمل الفصول التالية من الرابع حتى العاشر:

ويشرح بتجديد أكثر ودقة "ميكانيك شرود ينغر" الموجي والذي يعد ركيزة أساسية لاستيعاب جوانب رئيسية في الميكانيك الكمومي مثل القياسات والزخم الزاوي وسلوك الجسيمات في مجال القوى المتناظرة كرويا.

- **الجزء الثالث:** ويشمل الفصول الثمانية الأخيرة:

ويمثل توسعا في مدى المسائل التي يمكن التعامل معها وتطبيقاتها على صنوف هامة من هذه المسائل وبخاصة تلك التي تعنى بالتفاعل بين الذرة والحقول الكهرمغنطيسية. كما يتم التركيز في هذا الجزء على ميكانيك الكم الاحصائي.

وتبين المسائل والتمارين المحلولة في معظم الفصول شروحات وتطبيقات هامة لمختلف النظريات التي يعالجها هذا الكتاب.

لقد كلفنا في المركز العربي للتعريب والترجمة والتأليف والنشر السيد الدكتور آحو يوسف بترجمته والأستاذ الدكتور المهندس محمد علي سلامة بالمراجعة العلمية، وذلك بعد حصولنا على إذن رسمي من الناشر بالترجمة.

وإنا، إذ نضع هذا الكتاب القيم بعد أن تم نقله إلى اللغة العربية بين أيدي زملائنا وطلابنا في مختلف الجامعات العربية، لنأمل أن نضيف لبنة صلبة إلى مكتبتنا العربية، وأن نخطو خطوة إلى الأمام في مسيرة تعريب العلوم والتقانة.

والله نسأل أن يوفق جميع المخلصين من أبناء أمتنا العربية لما فيه خير اللغة العربية، وهو من وراء القصد.

الأستاذ الدكتور المهندس أحمد عمر يوسف

مدير المركز العربي

للتعريب والترجمة والتأليف والنشر

مقـدمـة

يقدم لنا ميكانيك الكم حالياً ، أفضل تصور متوفر عن العالم الفيزيائي وبخاصة عن عالم الذرة دون المجهري . هذا الكتاب هو مدخل إلى المفاهيم الفيزيائية والصياغات الرياضية لميكانيك الكم غير النسبي . ولأجل الحصول على أكبر فائدة من هذا الكتاب ، لابد للقارىء من معرفة الفيزياء الأساسية على مستوى ماقبل التخرج ، بما فيها الفيزياء الذرية والكهرمغنطيسيات والميكانيك الكلاسيكي . وكذلك تَلْزَم معرفة حساب التفاضل والتكامل وبعض المعرفة بالمعادلات التفاضلية .

إن القرار بأن يقتصر الكتاب على ميكانيك الكم غير النسبي مكّننا من سبر المفاهيم الأساسية لميكانيك الكم بعناية ، متجنبين مناحي التعقيد والقصور التي تعاني منها نظرية المجال . ونحن على يقين راسخ من أن التعقيدات المذكورة ، يجب أن يلتقي الطالب بها بعد اكتسابه بعض الإلمام بميكانيك الكم والإحساس الفيزيائي به .

لقد وُضِع هذا النص ، أصلاً بمثابة منهاج في ميكانيك الكم للسنة الأولى من الدراسات العليا ، ولكن القسم الأول منه مناسب ايضاً لمنهاج السويّة الأعلى . ويمكن تقسيم النص إلى ثلاثة أجزاء . في الجزء الأول ، وهو الفصول الثلاثة الأولى ، نلفت النظر إلى عجز التصورات الكلاسيكية عن شرح الكثير من الظواهر ذات المقاييس الذرية ونقترح الكيفية التي يجب ، وفقاً لها ، تغيير المفاهيم الأساسية للميكانيك الكلاسيكي ، بما يضمن تفسير المشاهدات التجريبية . ونُثْبت هنا أيضاً صواب نظرية الميكانيك الموجي بصدد سلوك الجُسَيْم ، كما نبين كيف أن سلوكاًشاذاً ـ من وجهة النظر الكلاسيكية ـ مثل تكمية الطاقة أو تكمية الزخم الزاوي أو « العبور النفقي » من قِبل جُسَيْم لحاجز كموني ، يمكن استخلاصه عن طريق شكلانيةٍ تعطي ، بشكل متلازم ، الجانب الموجي والجانب الجسَيْمي لذلك الواقع الذي يجب عده من الناحية الكلاسيكية جُسَيْماً مادياً .

الجزء الثاني ، الذي يشمل الفصول من الرابع حتى العاشر ، يبدأ بفصلين يضعان الأساس لمقاربة افتراضية ، أكثر شكلانية ، لميكانيك الكم الذي يلي تباعاً . ونحن بذلك نضع ميكانيك شرودينغر الموجي على اساس أكثر تحديداًودقة ،

ونستخدم هذا الأساس لمناقشة جوانب رئيسة في الميكانيك مثل القياسات والزخم الزاوي وسلوك جُسَيْم في مجال قوى متناظر كروياً .

هذان الجزآن الأولان اللذان يتم التركيز فيهما على فهم المبادىء الأساسية وصياغاتها الرياضية (مع حد أدنى من المعالجات الرياضية المُسْتخدمة ، التي كثيراً ماتحجب الجانب الفيزيائي من الموضوع) ، يشكلان ، لهذا السبب ، مدخلاً إلى الموضوع على السوية التي يستطيع طلاب مرحلة ماقبل التخرج أن يتعاملوا معها . وهكذا ، فإن هذا القسم من الكتاب صالح للاستعمال ضمن منهاج ماقبل التخرج ، إنه يوفر سعةً وعمقاً كافيَيْن لتعريف القارىء بالمفاهيم الأساسية لميكانيك الكم وبالتعبير الرياضي عنها ،ويشكل قاعدة لفهمٍ أعمق لاحقاً . ونعتقد أنه من المرغوب فيه عرض ميكانيك الكم على مستوى متقدم في مرحلة ماقبل التخرج متى أمكن وذلك لثلاثة أسباب : أولها أن ميكانيك الكم أداة أساسية في الفيزياء الحديثة ، لدرجة تستلزم التمكن من استخدامه في وقت مبكر ، بقدر مايكون ذلك معقولاً . أما السبب الثاني فيكمن في أن الصورة التي يقدمها ميكانيك الكم عن العالم تبدو بأشكال متعددة غريبةً عن معتقدات الناس اليومية ، ضمن شكلها المقنَّن في الميكانيك الكلاسيكي ، وذلك إلى حد يتطلب مدة زمنية محسوسة لتطوير المعرفة التي تسمح فعلاً بفهمٍ شامل للمغزى التام للمفاهيم المعنية . وأخيراً فإن كل سنة تجلب معها المزيد من الأفكار والتقنيات النظرية التي تشق طريقهاإلى منهاج الدراسات العليا ، ومن الواضح أن هذه المادة الجديدة يمكن ملاءمتها فقط بإهمال المادة القديمة أو بإدخال مادة جديدة ضمن منهاج الدراسة في وقت مبكر .

الجزء الثالث من الكتاب ، ويشمل الفصول الثمانية الأخيرة ، يمثل توسيعاً ملحوظاً في مدى المسائل التي يمكن التعامل معها . فنحن نُدْخِل هنا صيغاً بديلة لتمثيلات الشكلانية الرياضية وتأويلات هندسية لها ، كما نناقش أساليب التحويلات من تمثيل إلى آخر ونعالج أيضاً التحويلات القانونية وعلاقتها بالتحويلات من تمثيل إلى آخر ، ونطور الطرائق التقريبية ، بما يتيح توسعاً هائلاً في عدد القضايا التي يمكن معالجتها بشيء من الثقة بالنفس ، ثم نقوم بتطبيق تلك الطرائق على صنوف هامة من المسائل التي تخص المفاعلة بين الذرة والحقول الكهرمغنطيسية القوية (الكلاسيكية) . ويتم التركيز خلال النص على تقنيات الجبر وعلى تبيان قوتها وتناسقها .

ويتمتع الفصل الأخير المكرَّس لميكانيك الكم الإحصائي بأهمية خاصة . فنحن هنا نطور التقنيات التي تلعب دوراً متزايداً على الدوام في الفيزياء الحديثة ، وهذا الأمر كان يتم ، حتى الوقت الحاضر ، تجاهله في الكتب المخصصة لنظرية الكم.

لقد تم حساب الخطوط البيانية كافةً في هذا الكتاب ورسمها بعناية ،تجنُّباً لإمكان نشوء انطباعات مضللة لدى القارىء .

وبالنسبة للقارىء الذي يود توسيع فهمه للموضوع من خلال الاطلاع على كيفية تطوره زمنياً (ليس من موقع الإدراك المتأخر القائم على معارف اليوم الراهن ، بل عبر المنظور الذي كان يتراءى للناس الذين وقفوا على الخط الأمامي لعملية تطوير هذا الفرع من الفيزياء) ، فإن الفصل الأول يتضمن مراجع لكثير من المقالات التي كانت ، في حينها ، مفتاحاً لتطور وجهات النظر والمفاهيم الأساسية لميكانيك الكم .

إن التمارين ترد في نهاية معظم الفصول ، وهي أيضاً تعرض جوانب ونتائج مختلفة تتعلق بالصورة التي يقدمها ميكانيك الكم عن الطبيعة ، وتعطي « إحساساً » كمياً ببعض جوانب الطبيعة وتطوِّر المقدرة العملية على حل المسائل . إننا نعتقد أن مثل هذه المقدرة يمكن أن تأتي فقط عبر الممارسة الدؤوبة لاستخدام الأدوات الرياضية المساعدة .

في الختام يجب قول كلمة حول الترميز في الكتاب . فالرموز التي تعبر عن مقادير عددية تُكْتَب عموماً بالحروف الطليانية المائلة *(a)* ، والمقادير المتجهية بالحروف الرومانية الغامقة (**a**) ، والمؤثرات بالحروف الرومانية الكبيرة الباهتة (A) ، أما المصفوفات فبالحروف الغامقة مبتورة الذوائب (a) . وفي بعض الأحوال ليس من الواضح تماماً كيف يجب فهم رمز معين (وهذا مايصح بخاصة على الفصل الثالث عشر ، المتعلق بالتحويلات من تمثيــــــل إلى آخر) . في مثل حالات الالتباس هذه سعينا إلى اختيار الحرف الذي يضمن توفر أكبر قدر من الوضوح للعلاقات والمعادلات التي تكون هي الأقرب بالنسبة للقارىء ضمن سياق النص .

ونأمل أن تكون امكانات الخيار المتوفرة في هذا الكتاب معيناً للقارىء أثنا دراسته وليس عائقاً .

آذار *1960*

ر. ديكه

ج. ويتكه

الفصـل الأول

مـدخــل

1-1 ميكانيك الكم ، نظام التحريك :

ستبدأ هذه الدراسة في ميكانيك الكم من مناقشة موجزة لطبيعة النظريات الفيزيائية ولمجال صلاحية الميكانيك . يهتم رجل الفيزياء بعالَمَين اثنين : العالم الخارجي الواقعي الذي يعده عالماً ذا وجود موضوعي ؛ والصورة التخيلية لهذا العالم أي العالم الداخلي الذي يأمل رجل الفيزياء بأنه يشكل نموذجاً صحيحاً للعالم الخارجي . ويتكشف العالم الخارجي من خلال الانطباعات الحسية . . فمنذ الميلاد ، وفي الواقع حتى قبل ذلك ، يتعرض دماغ الانسان لوابل من المعطيات الناتجة عما يسببه العالم الخارجي من إثارة للحواس . وتشكل هذه المعطيات في البداية خَلْطاً لاتُرجى منه فائدة ، ولكن الدماغ ، تدريجياً ، يربط بين مختلف المعطيات ويبدأ بتذكُّر عينات من الترابطات الأساسية ؛ وتبدأ البنية الترابطية تطورها ببطء .

مثلاً : إن الشيء الذي يبدو ، على أساس معطيات حس اللمس ، مكوَّراً وأملس يترافق مع النموذج البصري لمفهوم « كرة » . وتكرار مثل هذه العينات من الترابطات ضمن معطيات الحواس ، يتم تفسيره بالتدريج كدلالة على العالم الخارجي ، الواقعي .

في الوقت الذي يبلغ الانسان عنده سن الرشد ، تكون صورة العالم الخارجي ، التي تم اكتسابها على هذا النحو ، قد اتخذَتْ شكلاً واقعياً ومتواصلاً ، من الناحَية الظاهرية ، لدرجة يصعب معها التصديق بأن ذلك مجرد صورة . هذه الصورة الداخلية أو النموذج الداخلي عن العالم الخارجي يمكن ـ بالطبع ـ أن يكون مشروطاً بطبيعة الإدراك البشري بقدر ماهو مشروط بطبيعة العالم الخارجي . فمن الواضح أن هذا النموذج متأثر بمحدودية أعضاء الحواس ويمكن أن يكون متأثراً بشكل الدماغ ، الذي له آليات تحويل شبيهة بطراز آليات الحاسوب الالكتروني . ويبدو من المعقول ، بالتالي ، أن نفترض أن دماغاً قادراً على التفكير الرقمي ، وفقاً لنموذج من نوع « on — off وصل ـ فصل » سيبني بسهولة نموذجاً فحواه أن الجسيم إمّا أن يكون

موجوداً في نقطة محددة من الفراغ وإما أن لايكون . لكنه يمكن أن يجد صعوبة في استيعاب النموذج ، الذي فحواه أن الجُسَيم لايتواجد هنا ولا هناك .

إن الصعوبة التي تبرز مع فكرة بدائية ، مثل الفكرة حول الجُسَيْم الذي يملك على الدوام موضعاً محدداً وسرعة محددة ، تكمن في كون الفكرة هي تعميم ينشأ عن المشاهدات الفجة كبيرة الأبعاد . فحركة الطير الطائر والحجر المقذوف يمكن ، بلا شك ، وصفها ظاهرياً بوساطة مسار ما . ولكن كلاً من الموضع المحدد والسرعة المحددة ، في كل لحظة من الزمن ، هما صفتان تخصان فقط النموذج الذهني ؛ لأن تحديد كل من الموضع والسرعة يتم دائماً بالمشاهدة ، أي بطريقة تقريبية فقط .

إن الميكانيك هو ذلك الفرع من فروع الفيزياء الذي يدرس تأثير القوى في حركة الأجسام . فضمن مايُعَرف بالصورة الكلاسيكية ، يبدو العالم مكوناًمن عناصر متمايزة ، يشغل كل منها موضعاً محدداًويتمتع بسرعة محددة . وهذه العناصر أو الجسيمات تتفاعل بعضها مع البعض الآخر بوساطة القوى التي يمكن ـ من حيث المبدأ على الأقل ـ معرفتها بشكل كامل ، كما يمكن حسبان تأثيراتها بدقة ، اثناء استقرائنا لحركات مختلف الأجسام المتفاعلة . إن الميكانيك الكلاسيكي هو عبارة عن نظام حسابي قائم على أساس قوانين الحركة ، أي قوانين نيوتن المشهورة ، والغاية منه هي وصف حركات الأجسام بدلالة الشروط الأولية المعطاة وذلك من خلال تعيين مواضع جميع الأجسام وسرعها بوصفها دالات زمنية . وعلى الرغم من النجاحات العديدة في تطبيق الميكانيك الكلاسيكي على مجال واسع من الظواهر الفيزيائية ، فقد اتضح عند بدايات القرن الحالي أنه ليس جميع الظواهر التي كانت معروفة جيداً آنذاك ، تجد تفسيراً لها في هذا الميكانيك وفي النظرية الكهرمغنطيسية الكلاسيكية . ولأجل التصدي لتحديات تلك المشاهدات التجريبية ، التي كانت غير قابلة للتفسير ، تم تطوير نظام جديد تماماً لعلم التحريك هو نظام ميكانيك الكم .

في الوقت الذي توجد فيه تشابهات ومتوازيات عديدة بين الميكانيك الكلاسيكي وميكانيك الكم ، نجدأن الافتراضات التي تشكل حجر الأساس في نظرية الكم ، تختلف جذرياًعن مثيلاتها في الميكانيك الكلاسيكي ، ويمكن عدها تأسيساً لطريقة مختلفة جوهرياً في النظر إلى الطبيعة . وهذا يعني أن النموذج الكماتي أو الصورة الكماتية للعالم تختلف جذرياً عن نموذجه او صورته الكلاسيكية .ويجب التأكيد منذ البدايه ، أنه لم يكن بمقدور المرء أن « يشتق » ميكانيك الكم ، أكثر من مقدرته

على اشتقاق قوانين نيوتن للحركة . عوضاً عن ذلك كان ميكانيك الكم قد تطور على قاعدة من الافتراضات والفرضيات التي تم التوصل إليها انطلاقاً من الحدس والتشابه مع المفاهيم الكلاسيكية ، ومن ثم جرت مقارنة الاستقراءات القائمة على شكلانية من الفرضيات ، مع مشاهدات الناس للعالم الخارجي . وإنه لمن دواعي الثناء على عبقرية الصاغة الأوائل للنظرية الكمية كونهم تمكنوا من ابتكار نظامٍ لاستقراء سلوك النظم الفيزيائية صمد ،ليس فقط لامتحان المشاهدات التجريبية ، التي كانت قابلة للتفسير ضمن إطار الميكانيك الكلاسيكي ، بل وكذلك لامتحان مشاهدات أخرى عديدة كانت تشير بوضوح إلى عجز النظرية الكلاسيكية .

من الصعوبة بمكان أن نبين ، ببضع كلمات ، وجه الاختلاف في الأسس الفلسفية بين الميكانيك الكلاسيكي وميكانيك الكم ، ولكن ربما كان المثال التالي يوحي بمدى الاختلاف . إن المفهوم الأساسي في الميكانيك هو مفهوم الملحوظ . ونقصد به أحد جوانب أو معالم (بارامترات) النظام ، الذي يمكن ـ مبدئياً على الأقل ـ قياسه قياساً مباشراً . إن الاختلافات الأساسية بين النظريتين الكلاسيكية والكمية هو أنه في الثانية ، ليست كل الملحوظات قابلة للقياس بدقة صارمة في آن واحد ، بينما العكس صحيح في الميكانيك الكلاسيكي . ذلك أن اجراء قياس على أي ملحوظ يدخل الاضطراب إلى النظام الفيزيائي ، بطريقة تدفع ملحوظاً آخر إلى تغيير قيمته . إن الاختلاف بين الافتراضات الكلاسيكية والكماتية ، مع حسبان هذه الناحية ، يكمن في أن تأثيرات الاضطراب الناجم عن القياس الكلاسيكي يمكن ، وبدقة وضعها في الحسبان أثناء استقراء السلوك اللاحق للنظام ، في حين أن التأثيرات الدقيقة للاضطراب الناجم عن أي قياس في ميكانيك الكم ، غير معروفة وغير قليلة للمعرفة أصلاً . لذلك فإن قياس موضع الجُسَيْم يُدخِل عدم تحديد ، لايمكن التنبؤ به ، بالنسبة لزخم هذا الجسيم . وإذا نشأت حالة كهذه ، فإن مجمل مفهوم المسار يجب مراجعته لأن هذا المفهوم الكلاسيكي يمكنه ، عندئذٍ أن يفقد بعضاً من دلالته إن لم نقل الدلالة بكاملها .

1-2 البرهان على عدم كفاءة الميكانيك الكلاسيكي .

قبل المناقشة التفصيلية لبعض المشاهدات التي استدعت ضرورة مراجعة الميكانيك الكلاسيكي ، من المفيد الآن أن نتمعن بايجاز في ذلك المجال الواسع من التجربة العملية ، الذي كان الميكانيك الكلاسيكي قادراً على التعامل معه بنجاح .

فقد كان الميكانيك الكلاسيكي يقدم صورة كاملة الدقة للأمور : فمن حركات الأجرام الفلكية (الكواكب والأقمار والمذنبات) إلى حركات الأجسام المرئية بالعين المجردة ، أثناء سقوطها الحر ، تحت تأثير الجاذبية ، أو انحدارها على سطوح مائلة ، أو ذبذبتها المرنة حول وضعية الاستقرار . وكذلك ، فإن حركة الأجسام المشحونة التي تتحرك عبر المجالات الكهرمغنطيسية ، واهتزازات الأوتار المشدودة أو الأغشية ، والأجسام الصلبة المشوهة والأمواج الصوتية في الغازات ، وجريان السوائل ، وانتشار الحرارة ، والنظرية الحركية للغازات ، كلها ليست سوى أمثلة قليلة عن الظواهر ، التي كانت الأفكار الكلاسيكية تُطَّبق عليها بنجاح . ويجب أن يدرك المرء بوضوح ، أن نهوض النظرية الكمية كان أمراً يتناقض وهذه الأرضية المتينة لانتصارات الميكانيك الكلاسيكي .

لقد كان الإشعاع الكهرمغنطيسي ، الصادر عن « الجسم الأسود » هو إحدى المشاهدات المبكرة ، التي لم تكن تتماشى مع التصور الكلاسيكي ، حيث أن تفسيره المباشر من قبل بلانك ، وعلى قاعدة من الافتراضات الجديدة جذرياً ، قد دشن الطريق نحو النظرية الكمية . والجسم الأسود هو ، تعريفاً ، ذلك الجسم الذي يمتص كل الاشعاع الكهرمغنطيسي الساقط عليه ، مهما كان تردد هذا الاشعاع . وتبعاً للمتغيرات الحراردينامية يمكن أن نبرهن أن مثل هذا الجسم يعد أفضل مُشعٍ للطاقة من أي جسمٍ آخر وعند درجة الحرارة نفسها مهما تباين تردد الإشعاع . ومن الممكن صنع نموذج بسيط للجسم الأسود يتكون من مُشعٍ مثقوب (حاوية جوفاء ذات ثقب جانبي) ، ويفترض أن التجويف يحوي مقداراً قليلًا من مادة ماصة ، وأن الثقب صغير بما فيه الكفاية لأن يستمر انعكاس الاشعاع (الداخل من خلاله) ضمن التجويف إلى أن يتم امتصاصه بشكل كلي من قبل المادة الماصة الداخلية . وفي هذه الحالة يعد الثقب جسماً أسود ، إذ أنه يمتص كل الاشعاع الساقط عليه . إن نموذجاً كهذا للجسم الأسود قيم جداً ، لأنه يمكِّننا من توصيف الحقل الكهرمغنطيسي ، داخل حاوية كهذه ، بِلُغة الأمواج المنعكسة ، إياباًوذهاباً ، بين جدرانها . وأية اضطرابات كهرمغنطيسية داخل الصندوق يمكن النظر إليها بمثابة تراكب بين مختلف الأمواج المستقرة ، من النموذج ذاته . كما أن الطاقة الكهربائية بالنسبة لكل من هذه الأمواج الكهرمغنطيسية المستقرة ، تتحول إلى طاقة مغنطيسية وبالعكس ، وذلك وفقاً لخط تغير مماثل لدالة الجَيْب (sin) . أما فيما يتعلق بالطاقة فإنه يمكن البرهان على أن

كل واحدة من تلك الأمواج تسلك سلوك المتذبذب التوافقي ، الميكانيكي ، العادي ، ولذلك يبدو من الطبيعي تطبيق قوانين الميكانيك الإحصائي الكلاسيكي على تلك المتذبذبات ، مثلها في ذلك مثل المتذبذبات الميكانيكية العادية . يفيد الميكانيك الإحصائي الكلاسيكي بأن متوسط الطاقة الحركية فـي أية جملة من الجُسَيْمات في حالة التوازن الحراري يساوي $\frac{1}{2}kT$ ضعفاً من العدد الاجمالي لدرجات الحريـة في هـذه الجملة ، حيث k هـو ثـابت بـولـتزمـان ويسـاوي 1.38×10^{-16} أرغ /°ك بينما T درجة حرارة الجملة . ومن المعروف أن المتوسط للطاقة الكمونية ، وبالنسبة لأي متذبذب توافقي ، يساوي متوسط الطاقة الحركية ، لهذا فإن المتوسط الإجمالي لطاقة المتذبذب الواحد سيكون مساوياً kT . وعندها ، سيلزمنا فقط أن نحسب عدد الأمواج المستقرة الممكنة ، ومن ثم عدد درجات الحرية ، حتى نتمكن من حساب متوسط الطاقة المخزونة في تجويف الحاوية الذي يتم بلوغه عند درجة معينة من حرارة الصندوق . ولقد تبين أن عدد الأمواج المستقرة ، الممكن في مجال قدره واحدة التردد وفي واحدة الحجوم من الصندوق ، لأجل تردد معين معطى ، يســـاوي $2 \times 4\pi\nu^3/c^3$ (*)، حيث ν هو التردد المعطى و c سرعة الضوء . ويبرز المعامل 2في هذا التعبير لأن أية موجة كهرمغنطيسية مستوية يمكن أن يكون لها استقطابان عموديان . وإذا أخذنا هذا التعبير بمثابة عدد درجات الحرية ضمن واحدة الحجم ومجال قدره واحدة التردد ، فإن التعبير ، الذي يعطي متوسط الطاقة في واحدة الحجم ومجال قدره واحدة التردد ، داخل الصندوق ، يمكن الحصول عليه من خلال الضرب بـ kT وهذا ما يعطينا :

$$u = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} kT \qquad (1-1)$$

وذلك من أجل متوسط الطاقة الكهرمغنطيسية في واحدة الحجم وواحدة التردد ، داخل الصندوق . وإنها لمسألة بسيطة أن نحسب تدفق الطاقة w عبر الثقب

(*) انظر :

M. Born, *Atomic Physics*, Blackie and Son, Ltd., London, 5th ed., 1952, Chapter 8; F. K. Richtmyer and E. H. Kennard, *Introduction to Modern Physics*, McGraw-Hill Book Co., New York, 4th ed., 1947, Chapter 5.

وكلا هذين الكتابين يتضمن مناقشةً لمختلف التجارب ، التي بينت عجز الميكانيك الكلاسيكي بتفصيل أكبر مما سنعرضه في هذه الفقرة .

داخل الصندوق ، طالماأن كثافة الطاقة في الداخل معروفة وتقودنا المعادلة (1-1) إلى :

$$w = 2\pi \frac{\nu^2}{c^2} kT \qquad (1-2)$$

وهذا هو تدفق الطاقة عبر الثقب داخل الصندوق ، بواحدات الطاقة خلال الثانية ، عبر واحدة مساحة الثقب وضمن مجال قدره واحدة التردد .

وبما أن كل الأجسام السوداء متكافئة فيما بينها ، وكما يمكن تبيانه من خلال اعتبارات علم التحريك الحراري ، فإن ماحصلنا عليه هو القيمة المفترضة أو النظرية لتدفق الإشعاع الناجم عن أي جسم أسود . ولكن ولسوء الحظ لاتتوافق هذه القيمة مع معطيات التجربة . فهي على عدم توافق جذري ، في نطاق الترددات العالية ، وتتمخض عن نتيجة غير معقولة كلياً ؛ بحيث أنه إذا أجرينا مكاملة على جميع الترددات ، فإن معدل الإشعاع الناجم عن الجسم الأسود سيكون لا نهائياً (وذلك من أجل جميع درجات الحرارة التي تفوق درجة الصفر المطلق) . ومن ناحية أخرى ، فإن قانون الإشعاع هذا ، والذي توصل إليه في عام 1900 ريليه وجينس (*)، يعطي نتائج منسجمة مع التجربة ضمن حدود قيم التردد الصغيرة بما فيه الكفاية ، ودرجات الحرارة العالية بما فيه الكفاية (مما يعني كميـــــاً أن $T/\nu \gg 10^{-10}$°K-sec). وإنه لمن دواعي القلق أن تكون هذه النظرية على انسجام مع التجربة ضمن حالة محدودة ، وعلى تناقض صارخ معها في الحالات الأخرى ، ذلك لأن النظرية تنتج ، بطريقة لا لبس فيها بتاتاً ، باستخدام كل من افتراضات الميكانيك الإحصائي الكلاسيكي وميكانيك نيوتن الكلاسيكي ومعادلات ماكسويل للمجال .

تمكّن ماكس بلانك (**) في عام 1901 من استنباط صيغة مقبولة للتوزيع الطيفي الخاص بإشعاع الجسم الأسود ، وذلك باعتماده افتراضات كانت في الحقيقة ،

(*) انظر :

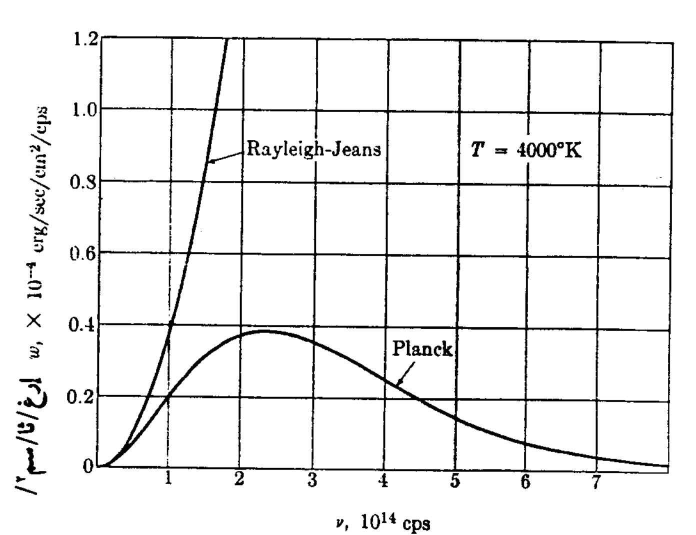
Lord Rayleigh, "Remarks upon the Law of Complete Radiation," *Phil. Mag* **49,** 539 (1900); J. H. Jeans, "On the Partition of Energy between Matter and Aether," *Phil. Mag.* **10,** 91 (1905).

(**) انظر :

M. Planck, "Ueber das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum, *Ann. Physik* **4,** 553 (1901).

جسورة جداً . وعلى الرغم من أن الوصف التالي للعمل المذكور ليس مطابقاً للوصف المعطى في حينه من قبل بلانك بالذات ،لكنه يبقى أنسب للتفسير العصري لنتائج هذا العمل . إن الافتراض الأساسي هو الآتي : يتم حساب درجات الحرية الداخلية للمشع المجوّف (أي عدد الأمواج المستقرة) ، على نحو موافق لما ورد أعلاه ، ولكن لايمكن لكل واحدة من الأمواج المستقرة داخل الصندوق أن تأخذ سائر قيم الطاقة الممكنة ،وكما تقضي بذلك ضمناً ، معادلات ماكسويل ، بل بإمكانها أن تتخذ فقط طاقات متقطعة ، صحيحة التناسب $0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \ldots$ إن ν هنا تشير إلى تردد الموجة المستقرة و h ثابت سوف نسميه الآن ثابت بلانك ، الذي يجب تحديد قيمته بطريقة تجعل الاستقراء على انسجام مع التجربة . ومن ثم يجري الافتراض بأن احتمال تمتع الموجة المستقرة بطاقة من هذه الطاقات المرافقة لها ، يُعطى من خلال معامل بولتزمان العادي ، والذي يتم تحديده من علم الميكانيك الاحصائي ، وبالتحديد يفترض أن احتمال الاثارة يساوي مقداراً يتناسب طرداً مع $\exp(-E_n/kT)$ ، حيث $E_n = nh\nu$. ويمكـــن باستخدام هذه الافتراضات كتابة متوسط الطاقة للمتذبذب الواحد كالتالي :

$$\bar{E} = \frac{\sum_n nh\nu \exp(-nh\nu/kT)}{\sum_n \exp(-nh\nu/kT)} = kT\left[\frac{h\nu/kT}{\exp(h\nu/kT) - 1}\right]. \quad (1-3)$$



الشكل 1-1. قوانين اشعاع الجسم الأسود عند درجة الحرارة: $T = 4000°K$

وتختلف هذه العلاقة عن مثيلتها الكلاسيكية بالعامل الوارد بين قوسين .
وبالتالي ، فإن التعبيرين الكلاسيكيَيْن عن كثافة الاشعاع u وتدفقه w سوف يتغيران من خلال ضربهما بالعامل المذكور نفسه لنحصل على :

$$u = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1} \tag{1-4}$$

و

$$w = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1} \tag{1-5}$$

ويمكن ربط العلاقة التي تعبر عن معدل الاشعاع والمعروفة بـ **قانون بلانك** ، مع قانون ريليه ـ جينس الكلاسيكي ، وذلك من خلال الضرب بالعامل ذاته :

$$w_{\text{Planck}} = w_{\text{R-J}} \times \frac{h\nu/kT}{\exp(h\nu/kT) - 1}. \tag{1-6}$$

ولابد من الاشارة إلى أنه عندما تكون درجات الحرارة عالية و(أو) عندما تكون الترددات منخفضة يصبح معدلا الاشعاع متساويين ، ويظهر هذا واضحاً من خلال تمثيل القانونين في الشكل (1-1) .

ينسجم قانون بلانك مع التوزيع الطيفي الملاحَظ لإشعاع الجسم الأسود انسجاماً دقيقاًجداً ، بفرض أن الثابت h يتم اختياره مساوياً القيمـــــــــة 6.624×10^{-27} erg/ sec . وإذا تمت مكاملـــــــة التوزيع الطيفي لكثافة الاشعاع ـ أي المعادلة (1-4) ، التي استقرأها بلانك ـ لأجل جميع الترددات يمكننا الحصول على الكثافة الاجمالية لطاقة الاشعاع في التجويف وهي :

$$W = \frac{8}{15} \frac{\pi^5 k^4}{h^3 c^3} T^4. \tag{1-7}$$

ولهذا ، تتناسب كثافة طاقة الجسم الأسود ، وبالتالي كثافة الاشعاع أيضاً ، تناسباً طردياً مع الأس الرابع لدرجة الحرارة ، وهذه واقعة كانت معروفة منذ زمن طويل ، وأول من اكتشفها ستيفان (*) . أما بالنسبة لثابت ستيفان ـ بولتزمان σ الذي

(*) انظر :

J. Stefan, "Ueber die Beziehung zwischen der Wärmestrahlung und de Temperatur," *Fortsch. Physik*, 660 (1879).

يربط مابين معدل الإشعاع ودرجة حرارة الجسم الأسود (والذي كان لابد من استنباطه سابقاً من خلال أبعاد معدل الاشعاع) ، فإنه يمكن الآن استنباطه باستخدام الثوابت في قانون توزيع بلانك ، وهو يساوي :

$$\sigma = \frac{2\pi^5}{15}\frac{k^4}{h^3c^2}. \tag{1-8}$$

إن نجاح بلانك في الحصول على قانون دقيق لأجل توزيع إشعاع الجسم الأسود ، بافتراض أن متذبذبات الإشعاع يمكنها أن تتمتع فقط بطاقات متقطعة ، أوحى بإمكان تجريب المقاربة ذاتها للتأكد من إمكان الحصول على تفسير نظري لما يُلاحَظ تجريبياً من تبعية حرارية لدى الحرارة النوعية للأجسام الصلبة . فشكل التغير الحراري الذي كان يلاحظ ، تعذَّر إيضاحه بلغة الميكانيك الكلاسيكسي : يحتوي المولال الواحد من الجسم الصلب على N جزيئاً مترابطاً أو mN ذرة ، حيث N هو عدد أفوغادرو و m هو عدد الذرات في الجزيئة ، وطالماان لكل ذرة ثلاث درجات حرية انتقالية حينها تكون منعزلة ، وطالما أن العدد الاجمالي لدرجات الحرية سيبقى ثابتاً ، حتى عندما توضع في الحسبان المفاعلة بين الذرات ، فإن المولال المذكور يتمتع بدرجات حرية عددها $3mN$. وبما أن كل واحدة من هذه الدرجات يجب ان يرافقها متوسط طاقة يساوي kT ، وذلك بموجب التصورات الكلاسيكية ، كما وجدنا سابقاً ، لهذا ، فإن الطاقة الداخلية للمولال الواحد من الجسم الصلب يجب أن تساوي :

$$U = 3mNkT \equiv 3mRT, \tag{1-9}$$

حيث : R ثابت الغاز . وعندها يتوجب على الحرارة النوعية للمولال الواحد أن تكون ثابتة $m(3R)$ وهذا فحوى القانون التجريبي ، قانون ديولونغ وبيتيه .

ولكن ، وفي الوقت الذي نجد فيه أن الحرارة النوعية للمولال الواحد من مواد كثيرة ذات جزيئات وحيدة الذرة ، تساوي تقريباً $3R$ عند درجة حرارة الغرفة . فإن هنالك الكثير من المواد الصلبة التي لاتخضع لقانون ديولونغ وبيتيه . والأكثر من ذلك ، فقد لوحظ أن الحرارة النوعية لكل الأجسام الصلبة هي دالة تابعة للحرارة ، إذ تتغير هذه الدالة في مجال درجات الحرارة الدنيا من خلال T^3 . ولقد اقترح

اينشتاين(*) في عام 1907 ، ضرورة معالجة الجسم الصلب ، بوصفه جملة من المتذبذبات التوافقية التي تتمتع كلها بتردد قدره ν ؛ ومن ثم حسبان متوسط الطاقة الداخلية ، بفرض أن تلك المتذبذبات تتخذ فقط الطاقات المتقطعة التي اقترحها بلانك ، وتحديداً $nh\nu$. عندئذ ، نجد أن متوسط الطاقة للمتذبذب التوافقي البسيط ، ووفقاً للحسابات التي وردت سابقاً بخصوص الجسم الأسود ، سيؤدي إلى قيمة وسطية للطاقة الداخلية للمولال الواحد ، تساوي :

$$U = 3RT \frac{h\nu/kT}{\exp(h\nu/kT) - 1}. \qquad (1-10)$$

ولقد افضت علاقة الطاقة الداخلية هذه بدورها إلى اجراء تقدير نظري لقيمة الحرارة النوعية يمكن جعله منسجماًمع الحرارة النوعية الملاحظة تجريبياً ، وعلى مدى مجال عريض من درجات الحرارة وضمن اختيار ملائم لقيم التردد ν . ولكن وفي مجال درجات الحرارة المنخفضة جداً ، كان هذا التعبير أيضاً على تناقض مع قانون التغير T^3 الملاحَظ تجريبياً لأجل الحرارة النوعية . ولقد تم تفسير هذا التغير في الحرارة النوعية ، مع تغير درجات الحرارة . من قبل ديباي في عام 1912(**) إذ افترض ديبي أن حركات الذرات داخل الجسم الصلب يمكن معالجتها بلغة الأمواج الصوتية المختلفة ،والتي تتردد جيئة وذهاباً داخل المادة الصلبة ، وهذا يشبه معالجة بلانك لإشعاع الجسم الأسود . فتماماً ، كما يمكن للمرء أن يعبر عن مجال إشعاع الجسم الأسود داخل التجويف ، بلغة الأمواج المستقرة ، يمكنه التعبير عن الطاقة الحرارية داخل الجسم الصلب كطاقة أمواج صوتية داخلية . مثلاً : هناك في بلورات الصلب ذات الطراز التكعيبي ، أمواج صوتية مستقرة تنعكس جيئة وذهابا عن مختلف حواجز المكعب ، وهي ـ فيما إذا أُخذت ضمن تراكبها ، بعضها مع بعضها الآخر ـ يمكن استخدامها لتمثيل أية حركة ذبذبة فعلية تقوم بها الذرات في الجسم الصلب .

(*) انظر :

A. Einstein, "Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme," *Ann. Physik* **22**, 180 (1907).

(**) انظر :

P. Debye, "Zur Theorie der spezifischen Wärmen," *Ann. Physik* **39**, 789 (1912).

وفي هذه الحالة ، وكما في حالة اشعاع الجسم الأسود ، تتمتع هذه الأمواج الصوتية المستقرة (أو « الأنماط العادية للاهتزاز ») بقيم تردد مختلفة . وعدد درجات الحرية الاهتزازية هذه لدى الجسم الصلب ضمن مجال مقداره واحدة التردد ، يمكن حسابه ، كما في حالة اشعاع الجسم الأسود . وعلى الرغم من أوجه التماثل بين هذه المقاربة وتلك التي استخدمناها لأجل اشعاع الجسم الأسود ، هناك سمة اختلاف واحدة تكمن فيمايلي : ففي حالة الاهتزازات داخل الأجسام الصلبة ، توجد نهاية عظمى لتردد الأمواج الصوتية ، بما يتناسب مع طول الموجة الذي يساوي تقريباً ضعف المسافة الثابتة المميزة لطول ضلع الهيكل الشبكي ، وإذا استثنينا قيمة تردد القطع ، أي النهاية الأعظمية v_D ، فإن نظرية ديباي في الحرارة النوعية للأجسام الصلبة هي ، من حيث الجوهر نظرية بلانك نفسها في اشعاع الجسم الأسود .

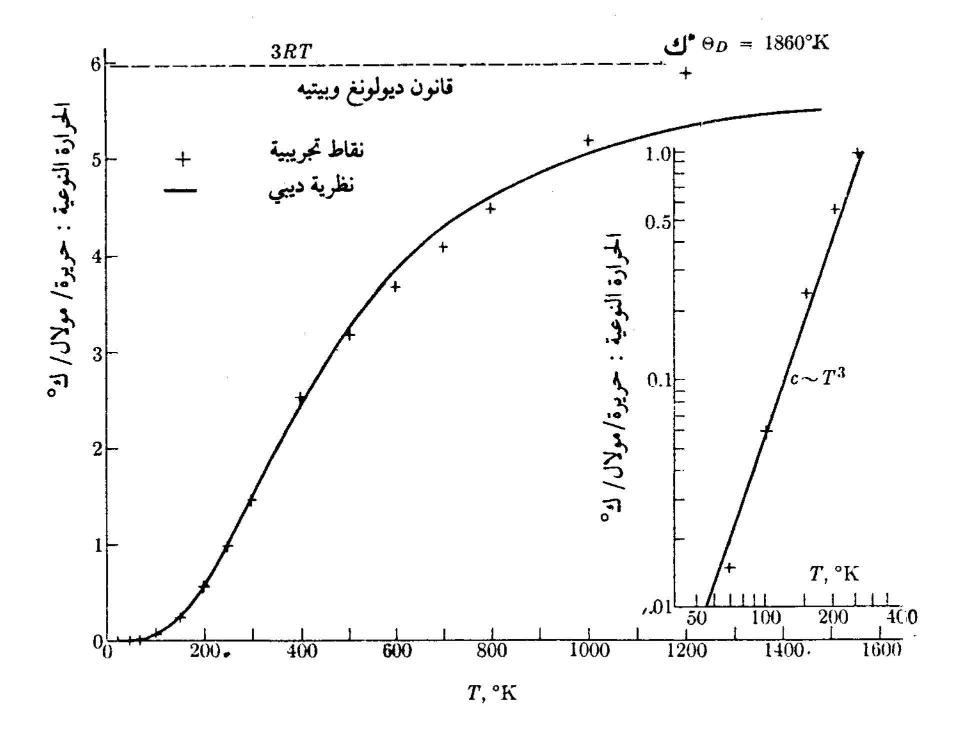
لاتكون الذبذبات ذات التردد العالي مثارة بشكل واضح عند درجات الحرارة الدنيا ، مما يجعل التأثيرات الناجمة عن فرض نهايةأعظمية لقيمة التردد ، غير محسوسة الأهمية . وهكذا ، من الممكن وهذه الحالة أن نتبنى بدون تغيير جوهري ، نتائج الحسابات المتعلقة بإشعاع الجسم الأسود . فالمعادلة (4−1) ، مثلاً ، في حال مكاملتها على جميع قيم التردد ، ستكون الطاقة الداخلية لواحدة الحجم من المادة المشعة داخل التجويف بمثابة دالة للأس الرابع لدرجة الحرارة ؛ والعلاقة المترتبة في حالة الأجسام الصلبة هي :

$$U = \frac{4}{15}\,\frac{\pi^5 k^4}{h^3}\,T^4\left(\frac{2}{v_T^3} + \frac{1}{v_L^3}\right) \qquad (1-11)$$

لقد تم هنا استبدال سرعة الضوء c بعامل يتضمن مفهوم سرعة الصوت المستعرضة v_T وسرعة الصوت الطويلة v_L في الجسم الصلب . ففي حالة الضوء تظهر الأمواج المستعرضة فقط ، ولذا لم يظهر سوى الحد الأول في العلاقة أعلاه ($v_T = c$) إن كل اتجـــاه من اتجاهات انتشار موجة مستوية في المادة الصلبة يقابله نمط طولي واحد ، بالإضافة إلى النمطين المستعرضين ، مما يؤدي إلى ظهور الحد الوارد بين قوسين في المعادلة (11−1) . ويجب التأكيد على أن هذه المعادلة تصلح فقط لدرجات الحرارة الدنيا بالمقارنة مع Θ_D المساة « درجة حرارة ديباي المميزة» والتي عندها تبدأ الأنماط العليا بالتهيج في جوار قيمة تردد القطع v_D . ومن الواضـــح من خلال

المعادلة (11-1) سريان قانون الـ T^3 بالنسبة لتغير الحرارة النوعية عند درجات الحرارة الدنيا . إن الانسجام الممتاز بين نظرية ديباي وقيم الحرارة النوعية ، الملاحظة تجريبياً لدى الأجسام الصلبة ، وكما هو مبين في الشكل (1-2)، كان عينة أخرى ، قوية جداً ، من البراهين على وجود نوع من الخلل العميق جداً في ميكانيك نيوتن ، حين يتم استخدامه ، على المستوى الذري ، لدراسة الجسم الصلب أو السائل أو الغاز .

إن اكتشاف النشاط الاشعاعي من قبل بكريل في عام 1896 أدى إلى ثورة في الأفكار المتعلقة بطبيعة الذرة وإلى الكثير من الملاحظات التجريبية التي لم يكن



الشكل 1—2 .الحرارة النوعية للماس كدالة تابعة للحرارة. الصلبان هنا تمثل القيم المقيسة ، أما المنحني الأصم فيمثل العلاقة المتنبأ بها وفقاً لنظرية ديباي ودرجة حرارة ديبي المميزة od تساوي 1860°K. أما الرسم التفصيلي المحشور في اليمين ، فيبين قانون الـT^3 في منطقة درجات الحرارة الدنيا .

بمقدورها التواؤم مع الأفكار الكلاسيكية . فبعض المواد المشعة يشكل مصدراً لجسيمات ألفا (نوى الهيليوم) الحاملة للطاقة ، والتي يمكن استخدامها لسبر باطن الذرة . وقد أعلن رذرفورد عن اجرائه لتجارب في بعثرة جسيمات ألفا ، تبيّن أن كتلة الذرة ، بكاملها تقريباً ، تتموضع في منطقة صغيرة جداً ، هي نواة الذرة . لقد تبين أن النوى الذرية تتمتع بأقطار أصغر بكثير من تلك التي كانت تُنسَب إلى الذرات المعنية ، انطلاقاً من اعتبارات النظرية الحركية (الكينيتيكية) الكلاسيكية. وكنتيجة لعمل رذرفورد هذا ؛ تكونت صورة عن الذرة التي تتألف من جسيم ثقيل ، صغير ، ذي شحنة إيجابية (وهو النواة) ، وحوله الكترونات تتحرك بطريقة تجعل الذرة ككل متعادلة كهربائياً ، كما هو معروف عنها . هذه الصورة عن الذرة تؤدي ، كلاسيكياً إلى استقراءات تقع في تناقض صارخ مع معطيات التجربة .

فمثلاً ، عند تطبيق الإحصائيات على الحرارة النوعية ـ وهو مانوقش أعلاه ـ سيكون من الضروري أن ينسب إلى الجسم الصلب عدد من درجات الحرية أكبر بكثير من مجرد ثلاثة أضعاف عدد الذرات التي يتشكل منها هذا الجسم ، وهذا مايقود إلى التنبوء بقيمة للحرارة النوعية أكبر بكثير من تلك التي تُلاحظ فعلياً في التجربة .

إن حجج البرهان هذه ، التي تنصبُّ على الحرارة النوعية ، ماكانت لتبين بوضوح أن قوانين نيوتن للحركة ، حصراً ، هي الخاطئة .فأفكار الميكانيك الإحصائي التي أدخلها جيبس كانت قائمة على افتراضات قاعدية تتعلق بطبيعة التوازن الحراري في النظام الميكانيكي . وبماأن تلك الافتراضات الإحصائية القاعدية يصعب التحقق منها ؛ كان يبقى ثمة احتمال أن يوجد خطأ ما فيها بالذات . ولكن الصعوبات الأخرى ، التي كانت ـ بوضوح ـ ذات منشأ غير احصائي قد نجمت عن بعض النتائج التجريبية المحددة المتناقضة مع تلك التي كان يجب اعتمادها في حال تطبيق قوانين نيوتن وماكسويل . مثلاً : بما أن الالكترونات تتحرك حول النواة ، بموجب نموذج رذرفورد للذرة ، فإنها في تسارع دائم إلى جهة النواة ، وعليها ، كنتيجة لهذا التسارع ، أن تشع وفقاً لما تقتضيه معادلات ماكسويل . ولكن الملاحَظ هو أن الذرات لاتشع عادة ؛ إذ من الضروري إثارتها بطريقة ما (بوساطة التفريغ الكهربائي أو التسخين) لجعلها تشع . زد على ذلك أن حسابات مقدار الإشعاع الذي تتلقاه الذرات ، عندما تدور الالكترونات حولها على المدارات التي تتحدد

كلاسيكياً ، تفيد بأن المرء يجب أن يتوقع إشعاعاًقوياًجداً في الحقيقة ، أقوى بكثير من أي شيء يلاحظ في الممارسة العملية .

ونظراً لهذه الصعوبات ، قام بور(*) في عام 1913 بتطوير افتراضات بلانك العميقة ، التي حظيت بذلك القدر من النجاح في حالة إشعاع الجسم الأسود وفي معالجة الحرارة النوعية للأجسام الصلبة . فقد افترض بوهر أن الذرة يمكنها أن توجّد فقط في حالات ممكنة معينة ذات طاقة محدودة . بعد ذلك افترض أن الذرة حين تقفز من حالة ذات طاقة E إلى حالة ذات طاقة أدنى E فإنها تصدر ضوءاً على شكل كم منفرد من الطاقة ، وأن تردد هذا الضوء المنبعث يعطى بالعلاقة :

$$E - E = h\nu \tag{1-12}$$

ومن خلال إدخال هذه الأفكار على نموذج بسيط جداً لنظام وحيد الالكترون (ذرة الهيدروجين) ، تمكن بوهر من تعليل الانتظام ، الذي كان معروفاً منذ زمن بعيد ، لدى خطوط طيف الضوء المنبعث عن ذرات الهيدروجين المثارة .

وتقدم بوهر بافتراضات إضافية حول أن تَكْمية الطاقة تعود بأصلها إلى صفة التقطُّع في الزخم الزاوي المداري للالكترون . ولكي نجد هذه العلاقة علينا أن نتخيل المدارات الدائرية الكلاسيكية لإلكترون شحنته $(-e)$ وكتلته m يدور حول نواة مثبتة من حيث الأساس شحنتها $(+e)$.وعندها يسفر تطبيق قانون نيوتن للحركة على القوة الكولومية والتسارع الشعاعي عن العلاقة التالية :

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \tag{1-13}$$

ولكن بور ، وكما ذكرنا آنفاً ، افترض أن الزخم الزاوي المداري قابل للتكمية :

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \tag{1-14}$$

حيث n عدد صحيح موجب أكبر من الصفر ؛ واستخدام هاتين المعادلتين بغية

(*) انظر :

N. Bohr, "On the Constitution of Atoms and Molecules," *Phil. Mag.* 26, (1913).

استبعاد v و r من معادلة الطاقة يعطي العلاقة التالية لقيم الطاقة الممكنة بالنسبة لذرة الهيدروجين :

$$E_n = \tfrac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} = -\tfrac{1}{2}mc^2\alpha^2 \frac{1}{n^2} \qquad (1-15)$$

حيث α ـ عدد عديم القيـــاس ويعرف باسم **ثابت البنية الدقيقة** ، اي أن :

$$\alpha \equiv \frac{2\pi e^2}{hc} \approx \frac{1}{137} \qquad (1-16)$$

ولهذا فإن طـاقة الـترابط في ذرة الهيدروجـين هي ، على الأكـثر ، $mc^2 \times 40000 / 1$ ، وهذه طاقة السكون للالكترون ، وبالانسجام مع كون الالكترون مربوطاًإلى الذرة ، ومع ضرورة بذل عمل لتحريره ، فإن تلك الطاقة سلبية ، بينما توافق طاقة الصفر نقل الإلكترون من الذرة إلى اللانهاية .

وإضافةإلى تعليل الطيف الضوئي للهيدروجين بطريقة مُرْضية إلى حد معقول ، تمكنت نظرية بوهر من التعليل لتكمية المتذبذب التوافقي . فالقوة المركزية التي تؤثر في جسيم كتلته m ، ويتحرك ضمن دائرة نصف قطرها r في حـــالة المتذبذب ثلاثي الأبعاد هي :

$$F = kr \qquad (1-17)$$

حيث k – « ثابت النبض » بالنسبة للمتذبذب . وإذا وضعنا هذا الحد بدل $\frac{e^2}{r^2}$ في المعادلة (13–1) واضعين في الحسبان هذه المرة أيضاً ، أن المدارات دائرية وأن الزخم الزاوي قابل للتكمية كما في المعادلة (14–1) فسنجد أن قيم الطاقة المسموح بها للمتذبذب هي :

$$E_n = \tfrac{1}{2}mv^2 + \tfrac{1}{2}kr^2 = nh\nu \qquad (1-18)$$

لقد كان وجود nفي مخرج الكسر في المعادلة (15–1) سبباًالزامياً لإغفال حالة $n = 0$ ، ولكن هذا السبب غير موجود بالنسبة للمتذبذب التوافقي ، ويفترض أن n يمكن أن تساوي الصفر ، في الحالة هذه .

توجد مجموعة أخرى من المعطيات التجريبية التي لم تلائم النُظرة الكلاسيكية إلى الطبيعة ،تتعلق بما يسمى التأثير الكهرضوئي . ففي عام 1887 ، وفي سياق

تجاربه ، المتعلقة بتوليد الأمواج الكهرمغنطيسية ، اكتشف هرتز أنه يمكن استخلاص الالكترونات من الأجسام الصلبة بجعل الإشعاع يسقط على تلك الأجسام . كما وجد لينارد وآخرون أن النهاية الأعظمية لطاقة تلك الالكترونات المُسْتَخْلصة ضوئياً تتوقف فقط على تردد الضوء ، الذي يسقط على السطح ، ولاتتوقف على شدته . والأكثر من ذلك ، تبين أن تلك النهاية الأعظمية لطاقة الالكترونات كانت ، في حالة أطوال الموجات القصيرة ، أكبر منها في حالة أطوال الموجات الطويلة .

وفي عام 1905 فسر اينشتاين(*) التأثير الكهرضوئي بطريقة مُرْضية أيضاً ، وذلك بالاستفادة من أفكار بلانك. فقد افترض أن الإشعاع يوجد على شكل كماتٍ محددة القياس ، أي أن الضوء يتكون من رُزَيْمات للطاقـــة قياسها $h\nu$. وافترض ايضاً أنه عند سقوط الضوء على سطح ما ، تستطيع الكترونات متفرقة من لدن الجسم الصلب أن تمتص كمات الطاقة هذه . لذا فإن الطاقة التي يكتسبها الالكترون تتوقف فقط على تردد الضوء ولاتتوقف على شدته ؛ فالشدة تحدد فقط عدد الالكترونات الضوئية ، التي ستغادر سطح الجسم الصلب في الثانية الواحدة .

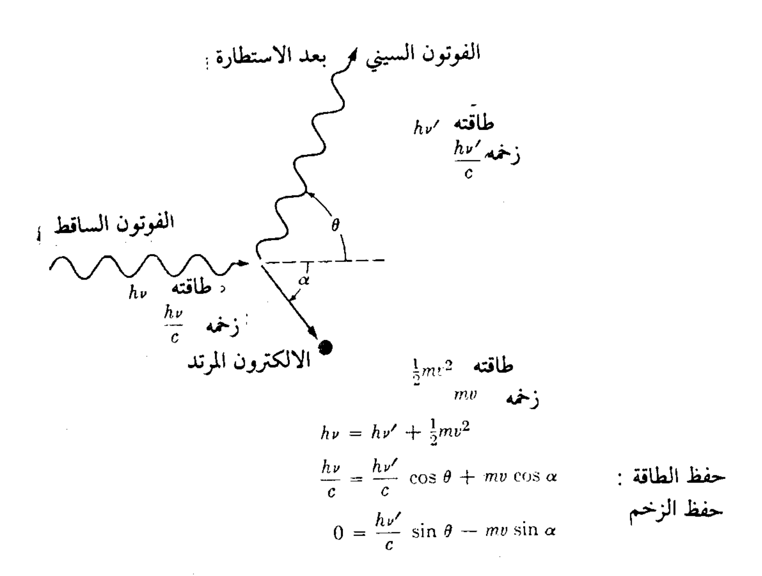
لقد فسرت مقترحات اينشتاين ماكان يُلاحَظ من أن النهاية الأعظمية لطاقة الالكترونات الضوئية تتوقف فقط على تردد الضوء ، وذلك بافتراض أن بعض الالكترونات قد يفقد جزءاً من طاقته قبل الانفلات من سطح الجسم الصلب . أضف إلى ذلك أن هذه التبعية للتردد كانت على انسجام كمي مع ماهو مُلاحَظ عملياً . ويجب التأكيد هنا على المدى البعيد ، الذي تصل إليه نتيجة إينشتاين هذه . فالنظرية الموجبة في الضوء كانت مبنية بشكل كلي على أساس تجارب متعددة في التداخل والحيود . لكن هذا التفسير للتأثير الكهرضوئي هو ، من حيث الجوهر ، تفسير جُسَيْمي ! فهو يؤكد أن الضوء يوجد على هيئة جسيمات صغيرة (كمات أو فوتونات) ، بإمكانها المفاعلةمع الكترونات مفردة ، إذ تنتقل الطاقة المرافقة للمفاعلة ، من الكم الضوئي إلى الالكترون وكأنها وحدة طاقية . إن هذا بطبيعة الحال استنتاج فيه مفارقة : من الصعب أن نتصور كيف يستطيع الضوء أن يكون موجة وجسيماً في آن واحد . وكما سنرى لاحقاً ، فإن محاولات فهم هذا التناقض آلت

(*) انظر :

A. Einstein, "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt," *Ann. Physik* **17**, 132 (1905).

إلى عملية تغييرٍ عميق للأفكار الرئيسة في الفيزياء .

وثمة تجربة أخرى أدت إلى النتيجة المتناقضة نفسها وضعها عام 1923 كومتون (*) . فأثناء دراسته لتبعثر الأشعة السينية ، اكتشف كومتون أنه عندما تجري بعثرة الأشعة السينية أحادية اللون ، فإن مايظهر في الإشعاع بعد البعثرة ليس فقط التردد الأصلي لهذه الأشعة ، بل وكذلك ترددات جديدة في أي اتجاه محدد من اتجاهات البعثرة ، وهي ترتبط بأطوال موجات أكبر من طول الموجة الأصلية . لقد تمكن كومتون من تكوين نموذج بسيط جداً لشرح هذا التأثير : لنفترض أن الأشعة السينية هي سرب من الكمات الشبيهة بالجسيمات والتي تتمتع كل منها بطاقة تساوي $h\nu$ وزخماً يساوي $h\nu/c$ ولنفترض ، من ثم ، أن الجسم الصلب يحوي الكترونات ضعيفة



$$h\nu = h\nu' + \tfrac{1}{2}mv^2$$

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c}\cos\theta + mv\cos\alpha$$

$$0 = \frac{h\nu'}{c}\sin\theta - mv\sin\alpha$$

الشكل 1−3. علاقات الطاقة والزخم في تجربة كومتون الخاصة ببعثرة الفوتون السيني من الكترون ساكن في بداية التجربة .

(*) A. H. Compton, "Wave-length measurements of scattered x-rays," *Phys. Rev.* **21**, 715 (1923); "The Spectrum of Scattered X-Rays," *Phys. Rev.* **22**, 400 (1923).

الارتباط يمكن عدها حرة ، من حيث الجوهر ، حيث أن بعثرة الكمات المكوِّنة للأشعة السينية عن تلك الالكترونات شبه الحرة يمكن حسابها ، كما لو كانت اصطداماً مرناً بين أجسام شبيهة بِكُرات البلياردو ، كما هو الوضع في الشكل(1—3).

واعتماداًعلى هذا النموذج ، يمكنناأن نحسب بدقة فَقْد الطاقة ، الذي يتعرض له الشعاع السيني ضمن زاوية تبعثر محددة . وانطلاقاً من ذلك ، يمكن حساب التغير الذي يطرأ على تردد الأشعة أثناء التبعثر . وإن الأشعة السينية التي لايتغير ترددها ، والتي تُلاحَظ في هذه الحالة ، من المفترض أن يكون مصدرها هو الالكترونات شديدة الارتباط ، في جوار النواة الذرية .

ولقد تبين أن تنبؤات هذا النموذج تتفق ، بتقارب تام ، مع المشاهدات التجريبية . وعلى صعيد آخر ، كان معروفاً من بحث سابق أنجزه فون لاويه أن الأشعة السينية يمكنها أن تتعرض للحيود ، وكان من الواضح أنها ببساطة إشعاع كهرمغنيطسي ذو موجة قصيرة جداً ، ومن هنا فهي شبيهة بالضوء .

وهكذا فإن الأشعة السينية ، اثناء التفاعل بينها وبين الالكترونات الحرة ، تتصرف على نحو مشابه جداً للجسيمات إذ تصطدم مع الالكترونات ، بينما نجدها ، أثناء انتشارها عبر البلورات ، تتعرض للانكسار والحيود ، كما لو كانت أمواجاً كهرمغنطيسية عادية . وهنا أيضاً برز مثال على الطابع الازدواجي للاشعاع الكهرمغنطيسي ، الذي يبدو في بعض الحالات كظاهرة موجية وفي بعضها الآخر يتجلى كجُسَيْمات وإن الواقعة الجديدة المكتشفة ، في سياق تأثير كومتون ، كانت تكمن ليس فقط في حفظ الطاقة أثناء المفاعلة بين الفوتونات والالكترونات ، بل وفي حفظ الزخم أيضاً .

وإن التجربة الضخمة الأخرى ، التي تعرض هذه الازدواجية الموجيّة ـ الجسيمية التناقضية على نحو أكثر إثارة ، هي تجربة دافيسون ـ غرمر عام 1927 . فبعض النظر عن الكثير من التجارب التي بينت ، وبشكل يبدو مُقْنعاً أن الالكترونات هي جُسَيْمات صغيرة مشحونة ، اكتشف دافيسون وغرمر (*) أن توجيه حزمة

(*) انظر :

C. Davisson and L. H. Germer, "Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel." *Phys. Rev.* 30, 705 (1927).

الكترونات إلى هيكل شبكي يؤدي إلى تبعثر الالكترونات مع مايرافق ذلك من تأثيرات الحيود النموذجية . وبكلمات أخرى كانت الالكترونات التي تُقذَف بها بلورة الصلب ، تتعرض للحيود من قبل الهيكل الشبكي لهذه البلورة ، كما لو أنها أمواج ، وذلك خلافاً للكثير من خواصها شبه الجُسَيْمية ، والتي غالباً ماتكشف عنها الالكترونات في الظروف العادية . وبالتالي لم تكن الازدواجية الموجية ـ الجُسَيْمية أمراًمقتصراًعلى الإشعاع ، بل تبين أنها ظاهرة أكثر عمومية : فبإمكان أي جسيم ـ ضمن حيثيات محددة ـ أن يسلك سلوك موجة ؛ وأية موجة (موجة كهرمغنطيسية ، مثلاً) بإمكانها أن تتكشف عن خواص جسيمية محددة .

1 ـ 3 بعض الميزات الضرورية لنظرية الكم .

لقد رأينا سابقاً أن اخفاقات الميكانيك الكلاسيكي كانت مرتبطة على نحو صميمي بطرزين عموميين من التأثيرات : أولهما يتلخص في أن بعض الكميات ، الذي يمكن له ـ في النظرية الكلاسيكية ، أن يتخذ مدى متصلاً من القيم ؛ يبدو الآن ـ بدلاً من ذلك ـ قادراًعلى اتخاذ قيم متقطعة . ونعني ، مثلاً ، طاقة الأمواج الكهرمغنطيسية أو طاقة اهتزاز الهيكل الشبكي للبلورة بتردد محدد ، أو الطاقات والزخوم الزاويّة المتعلقة بالمدارات الالكترونية في ذرة الهيدروجين . والطرز الثاني من التأثيرات هو مايسمى الازدواجية الموجية ـ الجسيمية ، حيث تبرز الطبيعة الموجية للضوء (كما يتبين من تأثيرات الحيود والتداخل) وطبيعتها الجسيمية (كما يتبين من التأثير الكهرضوئي وتأثير كومتون) . وهذا مايوازي على صعيد المادة ، حالة بروز وجهين لدى الالكترونات: وجه جسيمي وآخر موجي .

من الواضح أنه يتوجب على ميكانيك الكم ، بغية تفسير هذه التناقضات أن يتميز بطابع من شأنه الإحاطة بالتأثيرات المرتبطة بها ، في صلب بنيته الأساسية . وطريقة انجاز هذا الأمر هي موضوع الفصل التالي .

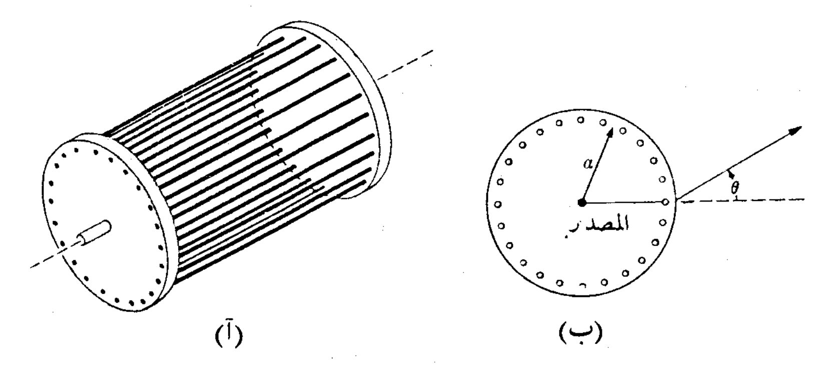
من ناحية ثانية ، تؤكد التجارب التي نوقشت أعلاه ، وبشدة، على أن المفهوم الكلاسيكي لـ « الموجة » أو « الجُسَيْم » لايمكنه أن يعكس طبيعة الالكترون أو الفوتون ، على نحو مطابق : فالحالة الفيزيائية المسماة « جسيماً ـ موجةً » لايمكن تصويرها تصويراً مطابقاً من خلال توصيف جوانب كلاسيكية مثل الموضع أو الزخم أو الاتساع أو الطور . وكما سنرى فإن التوصيف الشكلاني لحالة النظام الميكانيكي في ميكانيك الكم يتركز في دالة الموجة ψ . وهي كيان رياضي جديد لايمثل موجة بالمعنى

الكلاسيكي للتموُّج . والذي يفترض تمتعها بكل من التردد والطور والاتساع ، وجميعها قابلة للقياس .

وبالإضافة إلى ماذكر آنفاً وحتى يتوافق ميكانيك الكم مع الازدواجية الموجية ـ الجُسَيْمية ، يجب عليه أن يفسر تكمية الطاقة وتكمية الزخم الزاويّ . فالازدواجية الموجية ـ الجسيمية وتكمية الزخم الزاويّ ليستا ظاهرتين منفصلتين إحداهما عن الأخرى ، بل على العكس ، فهما مترابطتان بشكل وثيق .

لنأخذ التجربة التالية ، وهي تسمى تجربة غيدانكين ، أو تجربة « ذهنية » : بالرغم من كون هذه التجربة غير ممكنة التطبيق فهي مع ذلك ممكنة من حيث المبدأ ؛ وإذا تسنى انجازها ، فإن النتيجة يمكن التنبؤ بها بثقة معقولة القدر . وتتعلق هذه التجربة بـ « قفص السنجاب » المجوف ، أو « الطبلة » ، كما هو مبينٌ في الشكل (1—4 ، أ) ويتكون القفص من عدد كبير من القضبان المتوضعة بانتظام والتي تربط بين القرصين الجانبيين من حوافيهما . ويفترض ، كما قلنا ، أن عدد القضبان N كبير ، والقفص مثبت على حمالات ملائمة (لاتتعرض للاحتكاك) إذ يمكنه الدوران بحرّية حول المحور المحدد وفقاً للتصميم .

ولنتخيل أنه تم تثبيت مصدر للضوء أحادي اللون على المحور داخل القفص . وأن هذا المصدر يبث حزمة ضوء قطرياً باتجاه الخارج . ويفترض أن الحزمة تسقط على مقطع صغير من المحيط الدائري ، ولكنه كبير بحيث أنه يضم عدة من قضبان .



الشكل 1 — 4. (أ) طبلة القفص السنجابي « الكماتي » في التجربة « الذهنية » والتي تبين العلاقة بين الازدواجية الموجية ـ الجُسَيْمية وتكمية الزخم الزاوي . (ب) العلاقات الهندسية في القفص السنجابي « الكماتي » .

تشكل هذه القضبان حاجزاً مشبكاً يكاد يكون مستوياً تقريباً ، مما يضطر الضوء إلى الحيود، ويسبب تبعثره عبر مختلف الزوايا θ (انظر الشكل 1 — 4 ـ ب) ويعطى جيب زاوية الحيد من خلال الصيغة المعروفة جيداً :

$$\sin \theta = \frac{nN\lambda}{2\pi a} \qquad (1-19)$$

حيث الرمز n عدد صحيح يشير إلى مرتبة طيف الحيد ، وN عدد القضبان الموزعة بانتظام حول محيط الطبلة ، و λ طول موجة الضوء ، وa نصف قطر الطبلة .

ومن جهة أخرى ، إذا تذكر المرءُ الطبيعةَ الازدواجية (الموجية ـ الجسيمية) للضوء ، يمكنه الافتراض بأن كماًمفرداً من الضوء يغادر مصدره في الاتجاه المركزي ، وبما أن هذا الكم يتحرك قطرياً نحو الخارج ، فإنه لايحمل زخماً زاوياً بالنسبة لمحور الطبلة ، ولكن وبعد تعرض هذا الكم للتبعثر عبر زاوية θ من قبل القضبان المتوضعة في محيط القفص ، فإن الزخم الزاوي A الذي يحمله يساوي :

$$A = pa \sin \theta, \qquad (1-20)$$

حيث p زخم الفوتون المعطى بالعلاقة :

$$p = \frac{h\nu}{c} \qquad (1-21)$$

والتي تم إدخالها لشرح نتائج تأثير كومتون . وبالجمع بين المعادلات (19—1) و(20—1) و (21—1)نحصل على المعادلة التالية :

$$A = nN\hbar \qquad (1-22)$$

حيث $\hbar$ ثابت سوف يتكرر ظهوره كثيراً ، ويتحدد بالعلاقة :

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-27} \text{ (إرغ - ثا)} \qquad (1-23)$$

وإذا افترضنا (كما في الميكانيك الكلاسيكي) حفظ الزخم الزاوي ، فإن المعادلة (22—1) تبينٌ أن الزخم الزاوي المنقول إلى الطبلة من قبل الفوتون هو ضعف صحيح للمقدار $N\hbar$. وإذا كانت الطبلة في لحظة البداية ساكنة فإن حالات زخمها الزاوي الممكنة الوحيدة والناجمة عن نقل الزخم الزاوي المذكور هي أضعاف صحيحة

للمقدار $N\hbar$.وبالتالي ، فإن تكمية الزخم الزاوي للطبلة تأتي كاستدلال ذهني من تجليات الازدواجية الموجية ـ الجسيمية للضوء ، ومن السلوك الموجي أثناء الحيود والسلوك الجسيمي في عملية نقل الزخم المشابهة لتأثير كومتون .

من المفهوم بالطبع ، أن للطبلة كثيراً من حالات الزخم الزاوي ، اضافة إلى تلك المعطاة بالمعادلة (1—22) ومع ذلك ، تصعب رؤية السبب الذي يحول دون امكان اثارة الضوء لهذه الحالات الإضافية أيضاً . فكما سنرى فيما بعد تنتج تكمية الزخم الزاوي عن الفرضيات الأساسية في نظرية الكم .

إن كون الزخم الزاوي للطبلة قادراًعلى اتخاذ قيم صحيحة فقط ، مضاعفة لـ $N\hbar$ (وليس لـ $\hbar$) ، هو إلى حد ما تأثير كماتي خاص ، مقرون بالتناظر المحوري المضاعف N مرة ؛ودوران الطبلة بزاوية قدرها $2\pi/N$ سينقلها من تشكيل إلى تشكيل مطابق طالما أننا نضع في حسباننا موضع القضبان (وهو متماثل تماماً) في كل حالة .

إن وَضْع الزخم الزاوي المرتبط مع الفوتون في الحسبان يقدم دليلاًآخر على الطبيعة العامة لتكمية الزخم الزاوي . وهنالك نتيجة معروفة جيداً بين نتائج النظرية الكهرمغنطيسية الكلاسيكية فحواها أن الموجة الضوئية المستوية المستقطبة دائرياً تتمتع بكثافة للزخم الزاوي مساوية E/ω حيث E كثافة الطاقة و w التردد الدائري . وهكذا ، فإن كل فوتون مستقطبٍ دائرياً ذي طاقة $\hbar\omega$ يتمتع بزخمٍ زاويٍ مقرونٍ به يساوي $\hbar$. وهذا الأمر منسجم مع نظرية بـور بخصوص ذرة الهيدروجين ، حيث أن الفوتون المنبثق عندما تهبط الذرة من حالة طاقية ما إلى الحالة التالية الأدنى منها ، يجب أن يأخذ معه مقداراً من الزخم الزاوي يساوي h إذا كان قانون المصونية سارياً على الزخم الزاوي لكامل النظام أثناء الانتقال الاشعاعي .

وإذا افترضنا أن الزخم الزاوي لقفص « السنجاب » قابل للتكمية بما يتفق مع المعادلة (22—1)، فمن الممكن أن نعكس الحجج الواردة أعلاه ونبين كيف أن هذا الافتراض يقودإلى توقع أن جميع الجسيمات ستتعرض للتبعثر من قبل القضبان المزنزة لمحيط الطبلة ، (سواء أكانت هذه الجسيمات إلكترونات أم ذرات هيلوم أو حتى كرات البيسبول)، وكأنها تتمتع بخواص موجةٍ ، طولها المميز هو دالة للزخم الخاص بالجسيم .

إن الحجة من حيث الجوهر ، مطابقة لتلك الواردة أعلاه ، باستثناء أن الافتراضات والاستنتاجات قد تبادلت الآن أماكنها . فلنتخيل مصدر الجسيمات في

مركز القفص . وكمثال ، لنفترض أن قاذفة الالكترونات تبث حزمة الكترونات ذات طاقة واحدة باتجاه قطري نحو الخارج ، إذ تصيب منطقة جزئية من محيط الطبلة . وإذا مارمزنا لزخم الالكترون بـ p . فعندئذ ـ ونظراً لأن الزخم الزاوي الإجمالي (للطبلة و الالكترون) يجب أن يخضع لقانون الحفظ ـ لابد للزخم الزاوي للالكترون ، وبعد تعرضه للتبعثر من قبل القضبان ، أن يأخذ إحدى القيم المعطاة بالمعادلة :

$$A_e = pa \sin \theta = nN\hbar \qquad (1-24)$$

هذه المعادلة نموذج على المعادلات التي تصف تأثير الحيود : جيب الزاوية θ يساوي n ضعفاً من ثابت ما ، حيث n يمكنها اتخاذ قيم صحيحة ، موجبة وسالبة على حد سواء .

إن المعادلة (24—1) من حيث الجوهر مطابقة للمعادلة (19—1). فكلما نظرنا إليها بوصفها معادلة حيود ، يكون من السهل حساب طول الموجة المميز للموجة بعد الحيود ، عبر مقارنة المعادلتين (19—1) و (24—1) وتكون النتيجة هي :

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (1-25)$$

لذلك ، نستطيع صياغة الاستنتاج بأن أي جسيم ، سواء أكان الكتروناً أم ذرة أم حتى شيئاً أكبر حجماً ، سيتعرض للتبعثر عن شبكة القفص ، وكأنه موجة ذات طول يتناسب عكسياً مع زخم الجسيم . هذه المعادلة الدقيقة ، التي تربط طول موجة الجسيم مع زخمه ، كان دي برولي(*) أول من توصل إليها ، انطلاقاً من حجج تعتمد على السرع الزُمرية للأمواج ومن افتراضات حول ترددات الذبذبة. هذا وقد أكدت التجارب الخاصة بحيود الالكترون ، كتجارب دافيسون وغرمر ، صحة المعادلة (25—1) بدرجة عالية من الدقة . إن التجربة « الذهنية » هذه تؤكد أن افتراض الطابع الازدواجي الموجي ـ الجسيمي للضوء من شأنه أن يقود (بالنسبة لصندوق في حالة الدوران) إلى حالات من الزخم الزاوي تساوي أضعافاً صحيحة

L. de Broglie, "A Tentative Theory of Light Quanta," *Phil. Mag.* **47**, 446 (1926); "Recherches sur la Theorie des Quanta," *Ann. phys.* **3**, 22 (1925).

من $N\hbar$. وعلى العكس ، إذا تم الافتراض بأن زخم الطبلةله حالات من هذا الطراز ، فإننا نصل إلى الاستنتاج بأن أي نوع من الجسيمات سيتعرض للتبعثر من قبل الطبلة عبر زوايا تتحدد بتأثير الحيود وباطوال أمواج تعطيها المعادلة (25–1) .

4–1 خلاصـــة :

تم في هذا الفصل تقديم مناقشة موجزة للعلاقة بين ميكانيك الكم والميكانيك الكلاسيكي . فقد جيء على ذكر الفوارق الأساسية في وجهات النظر ، كما ورد توصيف لعدة تجارب من تلك التي لم تجد تفسيراً كلاسيكياً لها . إن هذه التجارب ، التي تتعلق بإشعاع الجسم الأسود وبالحرارة النوعية للأجسام الصلبة وبخطوط الطيف الذري وبالتأثير الكهرضوئي وحيود الالكترون وتأثير كومتون وظواهر كثيرة أخرى ، كلها كانت ذات مغزى كبير بالنسبة للدلالة على الطريقة التي يتوجب وفقاً لها تغيير الأفكار الأساسية للميكانيك الكلاسيكي . وقد أظهرت هذه التجارب جانبين اثنين في الطبيعة ، هما ازدواجية الموجة ـ الجُسَيم وعملية التكمية ، وهذان المفهومان كانا خارج حقل الرؤية في النظرية الكلاسيكية ، مما تطلب من ميكانيك الكم حل الكثير من المفارقات التي نجمت عن ذلك . وأخيراً ، فإن التجربة « الذهنية » حول قفص السنجاب « الكماتي » قد بينت العلاقة الوثيقة بين ازدواجية الموجة ـ الجُسَيْم وتكمية الزخم الزاوي وأفضَتْ إلى صيغة دي برولي لأجل طول الموجة الخاص بالجُسَيْمات المادية .

مســـائـل

1–1 لنفترض أن ذرة الهيدروجين تتكون من نواة مثبتة يدور حولها الكترون شحنته e تساوي 4.8×10^{-10} esu على مدار دائري كلاسيـــــــــــكي نصف قطره $a_0 = 5.29 \times 10^{-9}$ cm . قدِّرْ الاشعاع الكهرمغنطيسي الكلاسيكي الناجم عن هذه الذرة نتيجة تسارع الشحنة الالكترونية ، وقارن النتيجة مع الطاقة الكلاسيكية الإجمالية للذرة . مع العلم أن معدل إشعاع الشحنة المتسارعة $S = 2e^2a^2/3c^3$ حيث a هو التسارع و c سرعة الضوء .

2–1 من المعروف أن تجارب رذرفورد المتعلقة بتبعثر جسيمات ألفا (المنبثقة من مواد

مشعة مثل البولونيوم والراديوم) من الرقائق المعدنية قد ساهمت كثيراً في نشوء الصورة الحالية عن « الذرة ذات النواة » .

أ) كيف قدمت مثل هذه التجارب البراهين على وجود نواة في الذرة ؟ ب) ماهي الطاقة التي يجب أن يمتلكها جسيم ألفا حتى يحصل تبعثره بطريقة لا كولومية عن نواة شحنتها Z تساوي 50 ونصف قطرها $R = 8 \times 10^{-13}$ cm ؟ افترض أن الكمون خارج النواة كولومي بشكل صارم ، ولكنه يحيد عن شكله الكولومي هذا داخل النواة ذاتها .

1–3 ناقش كيف أن تجارب فرانك ـ هيرتز الخاصة بقياس الفَقْد في طاقة الالكترونات أثناء تبعثرها عن ذرات الغاز تتطلب الأفكار الكماتية لأجل تفسيرها .

1–4 في عام 1913 اقترح بـور إجراءً لأجل تكمية نظم محددة على أية أصناف عامة من النظم الفيزيائية كان يمكن تطبيق اجراء بـور هذا ؟ وعلى اية أصناف من النظم فشل تطبيقه ؟ .

1–5 بفرض أن حزمة من الأشعة السينية قد تم تكوينها أثناء قصف دريئة من الكربون بالكترونات عالية الطاقة، وأن الأشعة الناتجة هي وحيدة اللون و« ليّنة » ($\lambda = 44.5$ A) . ماهو فَقْد الطاقة بالنسبة لشعاع سيني واحد من هذه الأشعة حين يجري تبعثره بطريقة كومتون عن الكترون ما ؟ افترض أن الالكترون ينكص بزاوية قدرها 30° بالنسبة لاتجاه سقوط الحزمة .

1–6 احسب بالالكترون فولط الحد الأعظمي لطاقة الالكترونات الضوئية المنبعثة عن معدن يسقط عليه إشعاع طنيني أصفر صادر عن الصوديوم . هل يتوقف هذا الحد الأعظمي للطاقة على خواص المعدن ؟ إذا كان الجواب نعم ، فأية خواص بالذات لها الأهمية ؟ .

1–7 بيِّن ، مستخدماً الحجج الفيزيائية البسيطة ، أن نسبة الحرارة النوعية لواحدة الحجم في الفراغ إلى الحرارة النوعية لواحدة حجم الجسم الصلب تساوي (عند درجات الحرارة الدنيا) المقدار $\frac{2}{3}(v/c)^3$ ، حيث c سرعة الضوء و v سرعة الموجتين الصوتيتين (الطولية والمستعرضة) واللتين يُفترض أنهما متساويتان .

1–8 مجموعة من الذرات تتمتع بعزم ثنائي أقطاب مغنطيسي دائم ، ويتم بثها كحزمة عبر مجال مغنطيسي غير متجانس وتجميعها على مكشاف مناسب (تجربة شتيرن ـ غرلاش) . اشرح ماهي الفوارق التي يمكن توقُّعها إذا ماكانت الذرات تسلك

سلوك جسيمات كلاسيكية ، أو إذا كانت اتجاهات الزخوم الذرية مكمّاة مثلما يكون الحال فعلياً .

1–9 حقق دافيسون وغرمر في تجربتهما تبعثر الالكترونات متدنية الطاقة عن دريئة معدنية . احسب الزاوية بين الحزمة الساقطة واتجاه الحد الأعظمي لتبعثر الكترونات طاقتها 45 ev تسقط عمودياًعلى سطح البلورة المعدنية ، هذا إذا افترضنا أن المعدن ذو بنية تكعيبية بسيطة وأن طول ضلع الهيكل الشبكي يساوي 3.52 A .

1–10 احسب العدد الكماتي n المشابه لـ n الهيدروجين ، بالنسبة للأرض في مدارها حول الشمس .

1–11 بفرض أن الالكترون يدور حول البروتون وفقاً لقانون قوة معكوس أسُّه $\frac{3}{2}$. استخدمْ قواعد بـور في تكمية المدارات الدائرية بغية حساب المستويات الطاقية الممكنة في هذا النظام .

1–12 احسب عدد الفوتونات التي تشعها محطة اشعاع تبث 50kwمن القدرة بتردد يساوي 570 kc/sec .

1–13 أقصر طول ممكن للموجة الصوتية في كلور الصوديوم يساوي ضعف طول ضلع الهيكل الشبكي أي 5.6×10^{-8} cm.وسرعة الصوت ، تقريباً ، تســـــاوي 1.5×10^{5} cm/sec . أ) احسب القيمة التقريبية لأعلى تردد صوتي في هذا الجسم الصلب . ب) احسب طاقة الفونونات (وهي كمات الطاقة الاهتزازية) المرتبطة بذلك التردد . جـ) ماهي درجة الحرارة المطلوبة لإثارة هذه المتذبذبات كما يجب ؟ .

الفصل الثاني

الميكانيك الموجي

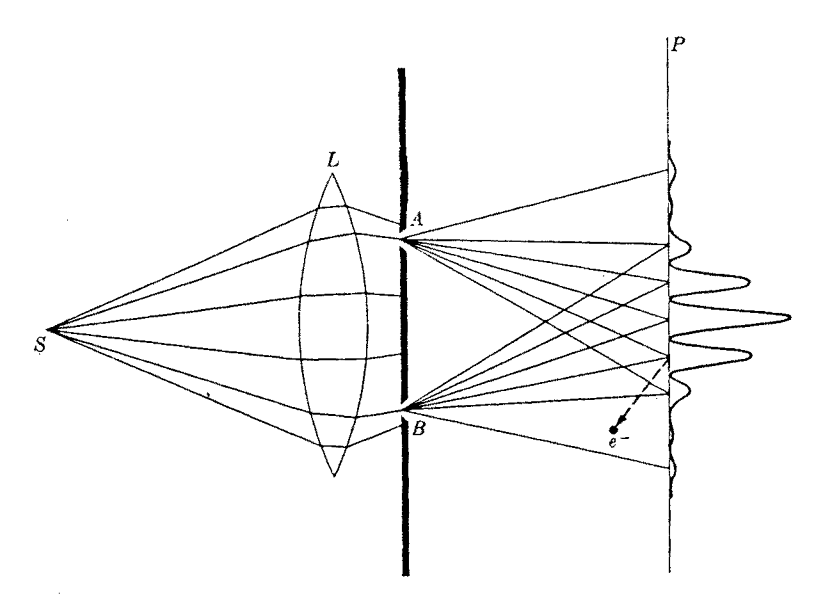
2-1 ازدواجية الموجة - الجُسَيْم :

رأينا في الفصل السابق ، أن الجسيمات - في أوضاع معينة - تبدو وكأنها أمواج ، والعكس بالعكس . ويمكن حل هذه المفارقة فقط بإدخال تغييرات جذرية على التصورات النظرية حول الأمواج والجسيمات . ويمكن تركيز المسألة بشكل واضح جداً ، إذا درسنا التجربة المثالية المعروضة في الشكل (2-1) إذ من السهل بمكان أن تُوضَع تجربة كهذه . إنها تجربة يونغ الشهيرة في التداخل مع تعديل هام يكمن في أن الحجاب الآن هو مشع كهرضوئي ويتم تركيز الضوء أحادي اللون النابع من المصدر S ، على الحجاب P ، بوساطة العدسة L وثمة حجاب معتم فيه شقان A و B يتم تثبيته بين L و P .

من الملاحظ أن الالكترونات الضوئية تنزع إلى الانبعاث من الحجاب المشع للضوء P في المواضع الموافقة لأهداب التداخل المضيئة ، ولاتنبعث أبداً من مراكز أهداب التداخل المظلمة . ومن ناحية ثانية ، فإن مواضع أهداب التداخل المضيئة والمظلمة ، على P ، تتوقف على المسافة بين A و B .

وتنطوي هذه النتيجة على المفارقة في عدة من جوانب . فكما رأينا في الفصل الأول ، يمكن فهم التأثير الكهرضوئي فقط في قاعدة التصور الفوتوني عن الضوء . ومن جهة أخرى وحتى يؤثر الفوتون الصغير بما فيه الكفاية في الكترون واحد ، فإن هذا الفوتون لن يكون - وفي أغلب الظن - قادراً على العبور من كلا الشقين A و B . وفي الواقع ، يمكن لمكشاف الفوتونات والذي قد يوضع في أحد الشقين (A أو B) أن يمسك الفوتون كله أو أن لايمسك شيئاً ، لكنه عاجز عن الإمساك بجزء من الفوتون ، وهذا مايطرح السؤال حول كيف يستطيع الفوتون الذي يمر عبر A أن يتأثر بوجود B؟

يكمن أحد الاحتمالات الجلية في أن بعض الفوتونات يمر عبر A وبعضها الآخر عبر B وأن الفوتونات المختلفة يؤثر أحدها في الاخر بطريقة تجعلها تصل فقط إلى



الشكل 2-1. تمثيل تخطيطي لتجربة يونغ في التداخل يعرض مفارقة الازدواجية الموجية - الجُسَيْمية

مواضع الأهداب المضيئة على الحجاب P . وهذا التفسير يجب أن يكون غير دقيق ويدلنا على ذلك إذا ماقمنا بتقليل شدة الضوء إلى تلك الدرجة ، التي يكون عندها العبور الوسطي للجُسَيْمات من خلال النظام مساوياً فوتوناًواحداً في الدقيقة . فحتى في هذه الحالة تستمر الفوتونات في التوافد فقط إلى أهداب التداخل المضيئة ! .

إن الشيء الذي يثير الانتباه في هذه التجربة هو أن سلوك أي فوتون معين غير قابل للاستقراء إلى حد كبير : فمع أنه سيظهر على هدب مضيء على الحجاب P فلا يمكن للمرء التنبؤ مسبقاً على أي هدب بالذات سوف يظهر . والأكثر من ذلك يصلح توزيع الشدة ضمن الهدب الواحد فقط للدلالة على توزيع الاحتمالات الخاصة بوصول فوتون معين . إنه لايسمح بتنبؤ دقيق حول مكان ظهور الالكترون الضوئي .

يبدو هذا الجانب الإحصائي في سلوك الفوتونات مختلفاً على نحو جوهري عن الاعتبارات الاحصائية في الميكانيك الكلاسيكي . ويمكن توضيح الاختلاف من خلال المثال التالي : يبدو أن احتمال مرور الفوتون عبر النظام باتجاه الحجاب P ، وفي حالة إغلاق أحد الشقين (A أو B)يساوي نصف هذا الاحتمال فيما لو كان الشقان

مفتوحين ، فهذا مايجب توقعه انطلاقاً من الاعتبارات الكلاسيكية . ولكن ، إذا كان أي من الشقين A أو Bمغلقاً ، تبدأ الفوتونات بالتوافد إلى المواضع التي كانت سابقاً لأهداب التداخل المظلمة : أي أن التناقص في عدد الطرق التي يمكن للفوتون الوصول عبرها من النقطة S إلى مكان الهدب المظلم قد أسفر عن زيادة في احتمال وصول الفوتون إلى هناك .

تطرح هذه التجربة في تداخل الضوء أفكاراً جديدة هامة ومتعددة. فأولاً ، تَدْخُل الاحتمالية في صلب ميكانيك الكم بطريقة جذرية وغير كلاسيكية. وعَدُّ الضوء حزمة من الفوتونات يكشف وجود موجة مرافقة تملك سعة تلعب دور سعة الاحتمالية ، ثم إن مربع هذه السعة (أي شدة الموجة) يمثل مقياساً لاحتمال العثور على الفوتون في نقطة محددة . وطالما يجري قياس الاحتمالية بوساطة مربع السعة يوجد امكان لحدوث تأثيرات داخلية من طراز تلك ، التي نوقشت هنا .

ثانياً : في حالة الفوتونات و ـ أغلب الظن ـ بالنسبة للجُسَيْمات الأخرى ايضاً ، تنتشر سعة الاحتمالية كأنها موجة نموذجية ، وقوانين الانتشار بالنسبة للفوتونات معروفة بتفاصيلها : إنها القوانين التي اكتشفها في حينه ماكسويل . أما التعديل الضروري الرئيس في تلك القوانين ، فيتعلق بتفسير شدة الموجة على أنها كثافة الاحتمالية بالنسبة للفوتون . ويكمن الأمر المضمر هنا في أن توزيعات الاحتمالية بالنسبة لجميع الجسيمات تنتشر كأنها نوع من الحركة الموجية وعندها تكمن احدى المسائل في استخراج قوانين الانتشار لسعات الموجة الخاصة بجُسَيْمات عدا عن الفوتون .

ثالثاً : يجب أن نلاحظ أن سعة الموجة ـ وبالنسبة للفوتونات ـ تحوي جميع المعلومات المفيدة حول توزيع احتمالية الفوتون ، وحتى بما في ذلك حالة استقطاب الفوتون . ولذا ، فمن المناسب أن تعدَّ معرفة توزيع الموجة في الفراغ مكافئة للمعرفة الكاملة لحالة الفوتون . ولهذا السبب نجد أن الدالة الخاصة بالجُسَيْم ، والمشابهة للدالة الموجية ، تسمى أحياناً **دالة الحالة**للجسيم .

إن المفارقة الكامنة في سلوك الجسيم ، الذي يتصرف أحياناًكموجة ، أو الموجة التي تتصرف أحياناً كجسيم ، يمكن ـ إذاً ـ حلُّها إذا نحن افترضنا أن الموجة تلعب دور سعة الاحتمالية ، في لغة التوصيف الاحتمالي للجُسَيْمات . وبشكل آخر ، من الممكن صياغة ميكانيك الكم بالبدء من التوصيف الكلاسيكي للموجة ، ومن ثم بتكمية معادلات الحركة الخاصة بها . عندئذٍ ، ستكون مختلف الحالات المكماة لطاقة

موجةٍ مستوية موافقة لـ : ...,0,1,2 جسيماً يملك كل منها زخماً ملائماً . هذه المقاربة للسلوك الكماتي للمادة ، والمعروفة بـ « نظرية المجال الميكانيكية ـ الكماتية » لن يتم تناولها في هذا الكتاب .

2-2 الدالة الموجية .

سنفترض ، وكخطوة أولى في صياغة الميكانيك الموجي لجسيم مادي ، أن الجسيم يتمتع بزخم محدد تحديداً جيداً . ولقد رأينا في الفصل السابق أن الموجة المرافقة للجسيم يجب ان تنتشر باتجاه حركة هذا الجسيم ، وأن يكون لها طول موجة يساوي :

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (2-1)$$

ويدل هذا على أن الموجة ستكون موجة مستوية على الشاكلة :

$$\psi = A \exp[i(kx - \omega t)] \qquad (2-2)$$

حيث :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad (2-3)$$

هذا وقد افترضنا هنا أن الموجة تنتقل في الاتجاه الموجب من محور السينات (o,x) .

إن المعادلة (2-2) مكتوبة بافتراض ضمني خلاصته أن التردد الزاويّ ω مُرفَق بموجة الجسيم ψ . ويجب الاستنتاج مقارنة مع حالة الفوتونات أن التردد معطى بالعلاقة :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \qquad (2-4)$$

حيث E طاقة الجسيم . إن هذه المطابقة بين التردد والطاقة سيتم التوصل إليها فيما بعد بطريقة أخرى .

ويجب الاعتقاد بأن الموجة المستوية يمكن اعادة تمثيلها بدالة حقيقية :

$$\psi = A \sin(kx - \omega t + \alpha) \qquad (2-5)$$

ولكن ـ وكما سنرى بالتفصيل لاحقاً ـ هناك أسباب تدعو للتفكير بأن جسيماً له

زخم زاوي معروف بدقة سيكون في حالة من عدم التحديد التام لموضعه ، وفي حالة كهذه ، سيكون توزيع الاحتمالية المقيس بشدة الموجة $|\psi|^2$ غير تابع لموقع الجُسَيْم .
وهذا يطرح مسألة أن تكون الدالة الموجبة الخاصة بجسيم ذي زخم محدد معطاة بالمعادلة (2−2) أكثر منها بالمعادلة (2−5).
أما بالنسبة لموجة مستوية تنتقل في اتجاه اعتباطي ، فيمكن كتابة المعادلة (2−2) كالاتي :

$$\psi = A \exp [i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] \tag{2-6}$$

حيث $\boldsymbol{k}$ متجه انتشار الموجة ، وتنطبق عليه المعادلة :

$$\boldsymbol{k} = \frac{1}{\hbar} \boldsymbol{p} \tag{2-7}$$

ويمثل المتجه $\boldsymbol{p}$ هنا زخم الجسيم .
إن الموجة التي تسقط على الحجاب P ،وضمن سياق تجربة يونغ في التداخل الضوئي ، ليست موجة مستوية ، ولكن مثل هذه الموجة المركبة تقبل التحليل إلى أمواج مستوية ،أي أنه يمكن عدُّها تراكباً لعدة من أمواج مستوية . لذلك من الهام أن توضع في الحسبان حالة الجسيم ، الذي يملك دالة موجية على شكل تراكبٍ لموجتين مستويتين أو أكثر .
لتكن الدالة الموجية للجسيم هي :

$$\psi = A_1 \exp [i(\boldsymbol{k}_1 \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] + A_2 \exp [i(\boldsymbol{k}_2 \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] \tag{2-8}$$

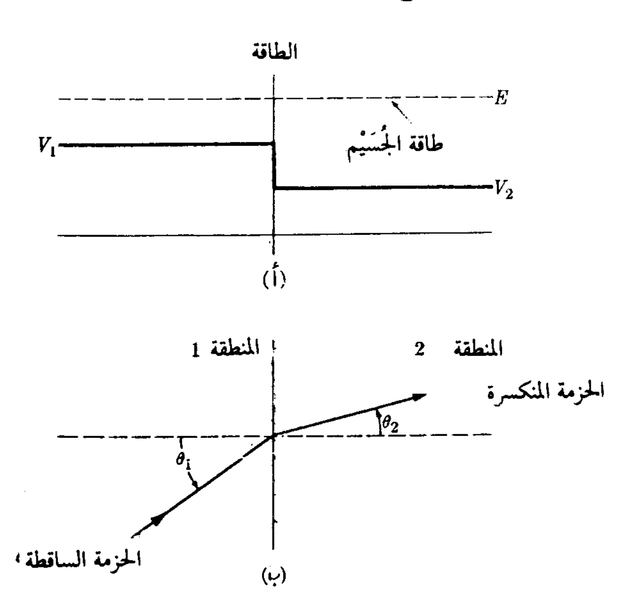
وبموجب التفسير الأساسي لاحتمالية الدالة الموجية ، يجب عد $|\psi|^2$ مقياساً لاحتمالية العثور على الجسيم في النقطة r منسوبة إلى واحدة الحجم ويساوي هذا المقدار :

$$|\psi|^2 = |A_1|^2 + |A_2|^2 + \{2A_1\overline{A_2} \exp [i(\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2) \cdot \boldsymbol{r}]\}_{\text{real part}} \tag{2-9}$$

حث يؤخذ فقط الجزء الحقيقي من العدد المتضمن بين القوسين الكبيرين .
وعلينا أن نلاحظ أن هذه الاحتمالية النسبية ليست جمعاً بسيطاً لمساهمة كل من الموجتين المستويتين الأصليتين ، بل هي تتضمن ـ إضافة إلى ذلك ـ الحد التداخلي الواقع بين قوسين كبيرين.وتكون كثافة احتمالية الموضع في هذه الحالة مركزة دون أن

تكون منتظمة في جميع نقاط الفراغ . ومن ناحية أخرى ، إذا حسبنا متوسط المعادلة (2–9) في كامل الفراغ ، فإن الحد التداخلي سيؤول إلى الصفر وذلك بسبب طابعه التذبذبي . إن متوسط $|\psi|^2$ الفراغي يمكن عده مقياساً لاحتمال العثور على الجسيم في مكان مادون صلة بموضع محدد . وتساوي هذه الاحتمالية الواحد . وبالتالي يجب تفسير $A_1{}^2$ و $|A_2|^2$ كمقياسين لاحتمالية العثور على الجسيم في مكان ما (وذلك دون اعتبار لموضع محدد) حين يكون لديه زخم يســـــاوي p_1 و p_2 على التوالي . ووفقاًلهذا التفسير تكون احتمالية امتلاك الجسيم للزخم p_1 مساوية $|A_1|^2/(|A_1|^2 + |A_2|^2)$ ، ويكـــون كل من الموضع الدقيق للجسيم وزخمه الدقيق غير محددين ، وذلك حينما يتم توصيف هذا الجسيم بدالة موجية كما في المعادلة (2–8) .

ويجب التأكيد على أن الاحتمالات المرافقة للجسيم في حالته المميزة بالمعادلة (2–8) تعود إلى الموقف الذي كان قبل فعل الملاحظة . وإذا تمت ملاحظة الجسيم لاحقاً في منطقة محدودة من الفراغ ، فأغلب الظن أن فعل الملاحظة سيكون قد شوش



الشكل 2–2 أ) توزيع الطاقة الكامنة الذي يبينّ التقطع في الكمون . ب) العلاقات الهندسية بالنسبة لحزمة الجُسيمات التي تتعرض للانكسار عند تقطُّع الكمون .

كلاً من حالة الجسيم ودالته الموجية . وعلى صعيد ثان ، إذا كان ماتجري ملاحظته هو زخم الجسيم ، فإنه سيكون مساوياً إما p_1 أو p_2 دون أية قيمة أخرى . وثانيةً ، يجب الافتراض أن فعل الملاحظة سيكون قد شوش النظام فغيّر دالته الموجية . فبعد فعل الملاحظة تكون الدالة الموجية هي الموجة المستوية الموافقة للزخم الذي تجري ملاحظته .

وكمثال على اتساق الشكلانية التي رسمنا معالمها حتى هذه النقطة ، سنفترض أن تياراً من الجسيمات يتحرك في فراغ مقسوم بوساطة سطح مستو إلى حيزين الطاقة الكامنة لكل منهما ثابتة ، ولكنها تختلف بين الأول والثاني (الشكل (2-2)) . ومن المفترض أن الجسيمات ، التي يمكن تخيلها كتيار من الالكترونات ، تتحرك من اليسار نحو السطح الفاصل بين المنطقتين 1 و 2 في اتجاه يشكل زاوية قدرها θ_1 مع ناظم السطح المستوي ، الذي يفصل بين المنطقتين بالمقارنة مع البصريات الهندسية ، سوف نسمي الزاوية θ_1 زاوية السقوط والزاوية θ_2 زاوية الانكسار ، وذلك بالنسبة للجسيمات . وإذا تم الافتراض أن الجسيمات تملك زخوماً محددة بدقة فإن الدالة الموجية للجسيم الوارد تكون :

$$\psi = A \exp\left[i\left(\frac{p \cdot r}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)\right] \qquad (2-10)$$

حيث استخدمت العلاقة بين التردد الزاوي ω والطاقة E المعطاة بالمعادلة (2-4) أما الزخم p فيرتبط مع الطاقة E من خلال العلاقة :

$$p = [2m(E - V)]^{1/2} \qquad (2-11)$$

وهذا يدل على أن زخم الجسيم يتغير عندما يتم انتقاله من المنطقة 1 إلى المنطقة 2 . وبالتالي فإن طول الموجة ، الذي تربطه المعادلة (2-1) مع الزخم سيتغير أثناء العبور من المنطقة 1 إلى المنطقة 2 وبإمكان المرء ـ وبشكل اعتيادي ـ أن يحدد معامل الانكسار n للوسط 2 بالنسبة للوسط 1 وذلك من خلال التناسب بين طولَيْ الموجة :

$$n = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{p_2}{p_1} = \left[\frac{E - V_2}{E - V_1}\right]^{1/2} \qquad (2-12)$$

ولقد تمت الاستفادة هنا من المعادلتين (2-1) و (2-11) وبماأننا عرفنا معامل الانكسار للمنطقة 2 بالمقارنة مع المنطقة 1 بشكل محدد ، يمكننا الاستفادة من قانون

سنِلّ ، الذي يعتمد على أسس البصريات الموجية ، وذلك بهدف حساب العلاقة بين الزاويتين θ_1 و θ_2 . وهذا يؤدي إلى :

$$\frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = n = \left[\frac{E - V_2}{E - V_1}\right]^{1/2} \qquad (2-13)$$

بماأن هذه المعادلة قائمة على اساس التصور الموجي المعروض هنا ، فمن المرغوب فيه أن يتم التأكد من هذه العلاقة مقارنة بالعلاقة الموافقة لها والتي يتم حسابها على أساس ميكانيك نيوتن ، طالما يمكن عد النظام المدروس نظاماً كبير المقاييس وتنطبق عليه قوانين ميكانيك نيوتن .

وبهدف حساب التناسب بين الزاويتين في ميكانيك نيوتن ، سنستخدم إحدى الميزات البسيطة لهذه المسألة ، وبالتحديد ، كون السطح الفاصل بين المنطقتين 1 و2 من نوع يجعل قوة ما تؤثر في الجسيم أثناء انتقاله من إحدى المنطقتين إلى الأخرى وتؤكد هذه القوى باتجاه معامدٍ للسطح . وبالتالي ، حين ينتقل الجسيم من منطقة 1 إلى منطقة 2 لن تتغير مركّبة الزخم الزاوي الخطي الموازية للسطح ، وثبات المركبة الظلية للزخم الخطي الخاص بالجسيم سوف يستخدم في حساب العلاقة بين θ_1 و θ_2 فكون المركبتين الظليتين للزخم الخطي ، الذي يملكه الجسيم ، متساويتَيْن في المنطقتين 1 و 2 كلتيهما ، يتجلى عبر العلاقة التالية :

$$p_1 \sin\theta_1 = p_2 \sin\theta_2 \qquad (2-14)$$

من هنا ، بإمكان المرءأن يستخلص وبطريقة مباشرة النتيجة ، التي تم الحصول عليها سابقاً بوساطة طرائق البصريات الموجية . وهكذا ، فقد جرى البرهان على التكافؤ بين شكلانية البصريات الموجية وميكانيك نيوتن الكلاسيكي بالنسبة لهذه المسألة الجزئية .

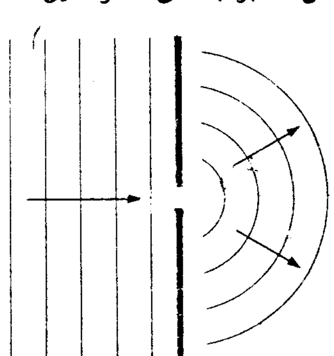
2-3 علاقـة عدم التحديد :

يطرح النقاش آنف الذكر فكرة هامة جداً من أفكار ميكانيك الكم ، حيث تكمن هذه الفكرة فيمايلي : إذا كان طول الموجة المميز ، والذي يُنسب إلى الجسيم (أي : طول الموجة الذي يحدد نوع الحيود في سلوك الجسيم) ، يرتبط مع الزخم بالمعادلة (1-2) ، فإن الجسيم المتموضع في منطقة محددة من الفراغ يجب أن يتميز بتباعد الزخوم . وإضافة لما ذكر يمكن بسهولة تبيان أنه كلما كان التموضع في الفراغ

أدق ، حصل التباعد في أطوال الموجات ، وبالتالي التباعد في الزخوم الضرورية لتوصيف الرزيمة الموجية ، هذا مثال خصوصي على فكرة عامة جداً في ميكانيك الكم تتعلق بتشكيلة من أزواج الملحوظات المتمِّمة أحدهما للآخر، حيث يمكن فقط بلوغ التوصيف الدقيق لقيمة أحد الملحوظَيْن في الزوج على حساب عدم التحديد فيما يتعلق بقيمة الملحوظ الثاني المتمِّم .

إن الفكرة حول أن ظاهر الحالة الفيزيائية لايمكن تحديده تحديداً كاملاً بالمعنى الكلاسيكي ، ولكن يمكن فقط توصيفه عبر لغة التخصيصات غير الدقيقة بصدد زوج من المتحولات ، هذه الفكرة تُعرَف باسم **مبدأ التتام** ويكون هذا المبدأ وثيق الارتباط بعلاقة (أو مبدأ) عدم التحديد ، والذي يقدر كمياً درجة الدقة الممكنة أثناء قياس كل زوج من ازواج المتحولات المتتامة . وسوف نناقش الآن عدة من أمثلة تعرض هذا المبدأ .

المثال الأول : لنتخيل موجة مستوية تسقط على منفذٍ له شكل الشق كما هو مبين في الشكل (2−3) ومن المعروف جيداً في البصريات الفيزيائية أن الضوء في مثل هذه الحالة يتباعد إثر عبوره للشق ، وذلك بسبب تأثير الحيود . وبالتالي ، وبعد عبوره من خلال الشق ، لايشكل الضوء موجة مستوية بسيطة ويجب تمثيله بتراكب أمواج مستوية تنتقل باتجاهات مختلفة ولكن جميع هذه الأمواج تتمتع بالتردد نفسه الذي كان للموجة الأصلية . ويمثل كل من هذه الأمواج المستوية في التراكب فوتونات ذات زخم معين كما رأينا آنفاً.ويتفاعل الشق ، وبطريقة غريبة ما مع الفوتونات الساقطة ليغير زخومها بمقدار لايمكن التنبؤ به على نحو دقيق .



الشكل $3-2$. تمثيل تخطيطي لحيود الموجة المستوية من خلال مرورها عبر شقّ .

يمكن اجراء التقدير الكمي للتشويش **الطارىء** على زخم الفوتون ، نتيجةً لمرور **الأخير** عبر الشق فلنفترض أن عرض الشق هو a وأن طول موجة الضوء **الساقط** هو λ عندئذ ، يظهر الصفر الأول في صورة حيود فراونهوفر الناجمة عن الشق ضمن زاوية تبعثر الفوتون ، حيث :

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{a} \qquad (2-15)$$

ويساوي عرض صورة الحيود (أو مقدار زاوية تبعثر الفوتونات عبر الشق) المقدار θ تقريباً ، وبالتالي فإن الزخم p_y في الاتجاه المعامد للاتجاه الأصلي x والذي يسقط فيه الضوء وبعد المرور عبر الشق سيكون مقدار عدم تحديده هو:

$$\Delta p_y \approx p\sin\theta = \frac{h}{\lambda}\cdot\frac{\lambda}{a} = \frac{h}{a} \qquad (2-16)$$

حيث استخدمت علاقة دي برولي :

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad (2-17)$$

يقدم الطرف الأيسر في المعادلة (16-2) تقديراًتقريبياً لنطاق القيم الممكنة بالنسبة للمركبة y من الزخم ، ويكون عرض الشق aمساويا مقدار عدم التحديد في موضع الفوتون ضمن الشق وعليه ، إذا رمزنا لعدم التحديد في المركبة y من الزخم بـ Δp_y وإلى الموضع ـ بعد عبور الشق ـ بـ Δy فإن جداء مقدارَيْ عدم التحديد هذين يُعطى بالعلاقة :

$$\Delta p_y\,\Delta y \approx h \qquad (2-18)$$

مما يعني تمثيل العلاقة بمساواة تقريبية فقط فثمة هناك سبب واحد يجعلنا لانحدد بدقة ماهو المقصود بـ« عدم التحديد » ، ويكمن في أن ماتملكه هو فقط مؤشرات تقريبية على قياس عدم التحديد في موضع الفوتون وزخمه . أما التعريف الأدق لعدم التحديد فسوف يرد في الفصل الثامن .

المثال الثاني : لنتصور الشكل (2-4) حيث هنالك مصراع ينفتح وينغلق ليسمح لرزيمة أمواج ضوئية بالمرور عبره . وسنفترض أن نبضة الضوء هذه تتكون من مجرد فوتون واحد . والمطلوب تحديد موضوع الفوتون داخل الرزيمة وزخمه . فإذا افترضنا الاتجاه x منحىً لانتشار الموجة . ورمزنا إلى طول النبضة الضوئية بـ Δx فمن

الواضح أن موضع الفوتون داخل الرزيمة يتمتع بعدم تحديدٍ قدره Δx وفي الوقت ذاته ، لايمكن التنبؤ ـ على نحو محدد ـ بزخم الفوتون ، نظراً لأن رزيمة موجية من هذا النوع تتطلب لتمثيلها تراكباً من الأمواج المستوية مختلفة الطول . وإنه لمن الضروري اجراء قياس الزخم بهدف التحديد الدقيق لقيمته . فلأجل الحصول على رزيمة موجية طولها Δx يلزمنا تراكب أمواج مستوية يتضمن نطاقاً قدره Δk من ثوابت الانتشار ، حيث :

$$\Delta k \approx \frac{1}{\Delta x} \qquad (2-19)$$

وبالاستفادة من الرابط بين ثابت الانتشار k وزخم الجسيم ، نجد أن ذلك يتعلق بنطاق من الزخوم يعطى من العلاقة التالية :

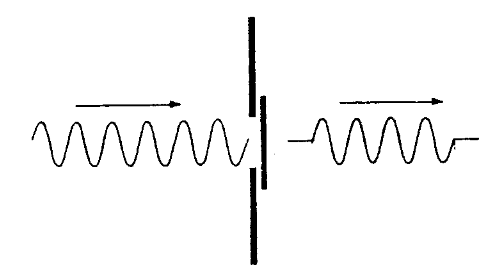
$$\Delta k = \frac{\Delta p_x}{\hbar} \approx \frac{1}{\Delta x} \qquad (2-20)$$

والتي تقبل الكتابة بالصيغة التالية :

$$\Delta p_x \, \Delta x \approx \hbar \qquad (2-21)$$

إذ تبين هذه العلاقةأن جداءعدم تحديد الزخم في الاتجاه x بعدمالتحديد في موضع الفوتون ضمن الاتجاه نفسه يساوي المقدار ħ تقريباً .

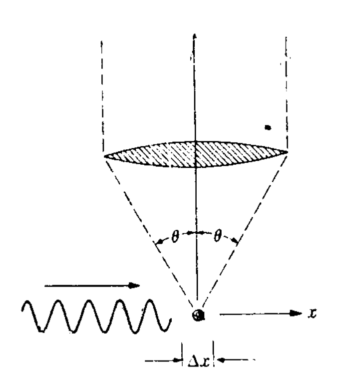
ومن المثير للاهتمام ، وبدرجة كافية ، أن الرابط ما بين مقدار معرفتنا لموضع الفوتون و زخمه ـ وبالشكل الذي برز به هذا الربط في هَذيْن المثالَيْن ـ يبدو عمومياً للغاية . ويمكن وضع مختلف التجارب الخاصة بتحديد الزخم في حال معرفة الموضع ، أو بتحديد الموضع في حالة معرفة الزخم ، أو بتحديد كليهما ضمن



الشكل 2 ـ 4 مصراع ضوئي يوضح كيفية تشكيل رزيمة موجية من موجة ضوئية مستمرة .

التقييدات المفروضة على الدقة . لكنه يبدو من غير الممكن وضع تجربة تحدد زخم الفوتون وموضعه بشكل متزامن وبدقة صارمة ، فالتحديد الأكثر دقة هو ذلك الذي تنطبق عليه علاقتا عدم التحديد (18–2) و (21–2) .

قد يخطر للمرء أن هذه الظاهرة تخص الفوتونات فقط ، وأنه لن تكون هنالك تقييدات على الجسيمات الأخرى ، ولكن تجربة مثالية على غرار تجربة غيدانكين (مرةأخرى) كان قد اقترحها هايزنبرغ وتعرف باسم مجهر هايزنبرغ ، تسمح للمرء أن يثبت وجود التقييدات نفسها على زخم الالكترونات وموضعه مثلما هو حال الفوتون على الأقل في هذا المثال . لنأخذ الشكل (2–5) والذي تجري فيه مراقبة الالكترون عبر مجهر في حين يتم تسليط ضوء على هذا الالكترون من اليسار . وبفرض أن الزخم الأولي معروف ، أو بالأحرى ، يكون الالكترون في حالة سكون لحظة البداية . يمكننا محاولة تحديد الموضع في الوقت ذاته ، ولكي نلاحظ أين يقع الالكترون يتوجب أن يرتطم به احد الفوتونات الساقطة ، ومن ثم يتعرض للتبعثر عبر المجهر ومن ناحية ثانية ، عندما يتبعثر الفوتون من الالكترون نحو المجهر ، ينقل إلى الالكترون زخماً مقداره غير معروف تماماً ، وذلك لأن منفذ المجهر ذو قياس محدد ويستطيع الفوتون التنقل أينما كان ضمن مخروط اضاءة العدسة . ولنفترض أن نصف زاوية هذا المخروط يساوي θ . ففي هذه الحالة وانطلاقاً من البصريات الموجية ، تكون قدرة



الشكل 2-5 العلاقات الهندسية في مجهرها يزنبرغ . يتوقف عدم تحديد الموضع على كل من طول موجة الضوء والزاوية θ ، في حين يُعزى عدم تحديد الزخم (وذلك بعد كشف الفوتون) إلى عدم تحديد الزخم المنقول من قبل الفوتون.

الميز لدى المجهر مساوية :

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin\theta} \qquad (2-22)$$

حيث λ تمثل طول موجة الضوء المستخدم و Δx هي عندئذ ، دقة تحديد موضع الالكترون باستخدام ضوء يتمتع بطول الموجة نفسه . ومن ناحية أخرى ، ينطوي الزخم المنقول إلى الالكترون على عدم تحديد قدرُه :

$$\Delta p_x \approx p \sin\theta \qquad (2-23)$$

وإذا أُخِذَتْ كلتا هاتين المعادلتين سويةً ، فإن العلاقة بين عدم التحديد في الزخم وعدم التحديد في الموضع وبالنسبة للالكترون بعد التجربة ، يمكن التعبير عنها بالمعادلة التالية :

$$\Delta p_x \, \Delta x \approx p\lambda = h \qquad (2-24)$$

ومرة أخرى ، يجب النظر إلى هذه المعادلة على أنها معادلة لتقدير المرتبة ، إذ أنها تؤكد أن جداء عدم التحديد في زخم الالكترون ضمن الاتجاه x بعدم التحديد في موضعه ضمن الاتجاه ذاته ، هو ـ كمياً ـ من مرتبة ثابت بلانك .

4-2 الرزيمات الموجية :

لقد رأينا أن الجُسَيْم ذا الزخم المحدد بدقة ليس له ـ في ميكانيك الكم ـ تموضع في الفراغ . والقرين ، الذي قد يكون مماثلاً للجسيم الكلاسيكي ، هو ـ في الميكانيك الموجي ـ الرزيمة الموجية ، أي تراكب مجموعة من الأمواج المستوية ، التي لها طول الموجة نفسه تقريباً والتي تتداخل مبيدة بعضها بعضاً في كل مكان ماعدا ذلك الحيز ، الذي تتمركز فيه الرزيمة الموجية . والرزيمة الموجية ، التي من شأنها أن تكون قريناً قريباً للجُسَيْم الكلاسيكي ، يجب أن تنطبق عليها العلاقة الكلاسيكية بين زخم الجُسَيْم وسرعته . عندئذٍ ، يمكن أن تُسْتَخْدم تلك العلاقة بهدف الحصول على المعادلة (2-4) .

لنفترض ، وكما في السابق ، أن مبدأ التراكب الخطي ينطبق على الأمواج ويعني هذا الافتراض أن ميكانيك الكم هو نظرية خطية ، وفي حالة كهذه يمكن تمثيل الرزيمة الموجية بوساطة تراكب عدد من الأمواج المستوية . ويمكن كتابة مثل هذا

التراكب بالنسبة لرزمة موجية على طول محور السينات x على شكل تكامل :

$$G(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp [i(kx - \omega t)]\, dk \qquad (2-25)$$

حيث : $\omega = \omega(k)$ لهذا وبغية تمثيل مجموعة أمواج تنتقل بسرعة زمرية مميزة ، من الضروري أن يكون هامش متجهات الانتشار k ، والذي يتضمنه التراكب ، صغيراً بكل معنى الكلمة . وبكلام آخر ، يفترض أن تكون الدالة $A(k)$ متميزة عن الصفر فقط في هامش صغير من القيم المجاورة لقيمة معينة k_0 . ويبدو هذا الشرط كالتالي :

$$A(k) \neq 0, \qquad k_0 - \epsilon < k < k_0 + \epsilon, \qquad \epsilon \ll k_0 \qquad (2-26)$$

ومن المفترض انه يمكن ضمن هامش صغير من القيم في جوار k_0 نشر الدالة $\omega(k)$ على شكل سلسلة قوى حول k_0 :

$$\omega = \omega_0 + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} + \cdots \qquad (2-27)$$

وإذا استخدمنا هذا النشر ، يمكن كتابة المعادلة (25–2) كالآتي :

$$G(x, t) \approx \exp [i(k_0 x - \omega_0 t)] \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp\left[i(k - k_0) \left(x - \frac{d\omega}{dk}\, t\right)\right] dk \qquad (2-28)$$

حيث يتخذ التكامل ، الذي يُعَدُّ دالة لكل من x و t الشكل التالي :

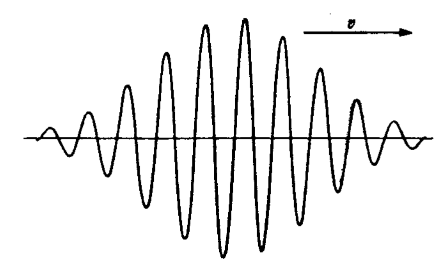
$$\int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp\left[i(k - k_0) \left(x - \frac{d\omega}{dk}\, t\right)\right] dk = B\left(x - \frac{d\omega}{dk}\, t\right) \cdot \qquad (2-29)$$

وعندها تؤول المعادلة (28–2) إلى :

$$G(x, t) = B\left(x - \frac{d\omega}{dk}\, t\right) \exp [i(k_0 x - \omega_0 t)]. \qquad (2-30)$$

ويمثل هذا ، من حيث الشكل ، جداء دالة مُغلَّفة (B) وموجة مستوية ، وهو يمثل انتشار زمرة من الأمواج التي تعطى سرعة « مغلفها » أي سرعتها الزمرية ، بالعلاقة التالية :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \qquad (2-31)$$



الشكل 2−6 . تمثيل تخطيطي لرزيمة موجية مركّبة ، حيث رسمنا الجزء الحقيقي من الموجة ψ مقابل المسافة في حالة البعد الواحد .

يتم في الشكل 2−6 عرض الموقف بطريقة تخطيطية . فالسرعة ، التي تتحرك بها الرزيمة الموجية مطابقة لسرعة الجُسَيْم المرافق لها . ومن جهة أخرى ، تعطى السرعة الطورية من خلال سرعة الموجة المستوية أي :

$$v_p = \frac{\omega_0}{k_0} \qquad (2-32)$$

إذا جرى الربط بين الرزيمة الموجية وجُسَيْم كلاسيكي ، فإن السرعة الزمرية (سرعة الرزيمة) v يجب أن تعطى بالعلاقة الكلاسيكية:

$$v = \frac{p}{m} \qquad (2-33)$$

حيث : p زخم الجسيم و m كتلته ، أو بالعلاقة:

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} \qquad (2-34)$$

وإذا استخدمنا المعادلة (2−7) ، فإن ذلك يفضي إلى المعادلة التالية :

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar}{m} k \qquad (2-35)$$

والتي يمكن مكاملتها بشكل مباشر لتعطي :

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \text{constant} = \frac{p^2}{2m} + \text{constant} \qquad (2-36)$$

إن الحد الأول في الطرف الأيمن من هذه المعادلة هو الطاقة الحركية للجُسَيْم ،

والحد الثاني هو ثابت المكاملة الذي يتمتع هو الآخر بقياس الطاقة . ويبدو من العقلاني قراءة هذا الثابت وكأنه الطاقة الكامنة لجسيم حر الحركة ، فهذه قراءة ممكنة ، لأن الجسيم ، الذي يتحرك بدون قوى تؤثر فيه ، يتحرك في منطقة تكون الطاقة الكامنة فيها ثابتة فعلاً . ومن الممكن تبيان أن هذه القراءة صالحة في حالة جُسَيْم (مُمَثّل برزيمة موجية) يتحرك من منطقة ذات طاقة كامنة ثابتةإلى منطقة أخرى طاقتها الكامنة ثابتةأيضاً ، ولكنها ذات قيمة تختلف . وفي هذه الحالة الخاصة ـ ورغم أنه يجب توقع التغير في طول الموجة عندما يتم الانتقال من إحدى المنطقتين إلى الأخرى ـ لن نتوقع تغيراً في التردد ، ذلك لأن الموجة الجيبية ، ذات التردد المحدد سوف تحافظ على هذا التردد بين نقطة وأخرى طالما أنها تنتشر في الفراغ.وبالتالي ، إذا بقي تردد الموجة ثابتاً أثناء انتشارها من منطقة ذات طاقة كامنة ثابتة إلى منطقة أخرى تكون طاقتها الكامنة ذات قيمة ثابتة مغايرة ، فإن الافتراض بأن ثابت المكاملة يمثل الطاقة الكامنة هو الافتراض الجائز الوحيد . وإذا تمسكنا بهذا المثال في الذهن ، يمكن إعادة كتابة المعادلة (36–2) على النحو التالي :

$$\hbar\omega = \frac{p^2}{2m} + V(x) = E \qquad (2-37)$$

حيث $V(x)$ ـ الطاقة الكامنة للجُسَيْم في النقطة x و E الطاقة الإجمالية . وهذه هي ، بطبيعة الحال ، العلاقة بين تردد الموجة والطاقة ، وقد سبق أن حصلنا عليها . ويجب أن نلاحظ أنه بالرغم من كون الحجج الواردة أعلاه تجعل تبعية الزخم للمتحول ω محددة بشكل كامل ، فإن هنالك غموضاً ناجماً عن اعتباطية المستوى الصفري بالنسبة للطاقة الكامنة . وبكلمات مغايرة ، يتوقف التردد الفعلي لهذه الموجة على اختيارنا لصفر الطاقة الكامنة ، وهو اختيار اعتباطي.ولهذا لايمكن للتردد أن يكون ذا دلالة فيزيائية مباشرة ؛ وهذا برهان على صحة التفسير الفيزيائي لطبيعة الموجة : فكما طُرِح سابقاً ، لاتملك هذه الموجة مغزىً فيزيائياً مباشراً كالذي نربطه ـ مثلاً ـ بالموجة الصوتية .

ومن الممكن الآن صياغة استنتاج هام آخر من المثال على حركة الرزيمة الموجية . فالوصف الكلاسيكي للجُسَيْم على أنه كينونة متركزة في الفراغ وتسير وفقاً لمسار فراغي ـ زماني محدد ، هو في الواقع تصوير مثالي لحركة الرزيمة الموجية . ونظراً لعجز أعضاء الحواس ، فإن الطابع الانتشاري لمثل هذه الرزيمات الموجية يستعصي

عادة على الملاحظة ، وإن الأفكار الفيزيائية ، التي تقوم على أساس ملاحظات كهذه ، هي صورة مثالية لها . لهذا تتحرك الرزيمة الموجية كجُسَيْم كلاسيكي ، ضمن الظروف التي يكون ميكانيك نيوتن فيها يوفر للحركة توصيفاً مطابقاً .

2-5 خلاصة :

تم النظر في تجربة يونغ في التداخل الضوئي بين شقين في سياق التصور الفوتوني (الجسيمي) عن الضوء ، وتم حل التناقضات الناتجة عنها من خلال إدخال الجانب الإحصائي على طبيعة الضوء . فميكانيك الكم يعتمد فرضيةوجود هذا الجانب الاحتمالي في الطبيعة ليقوّم سلوك الجُسَيْمات المادية أيضاً . كما تم ادخال مفهوم الدالة الموجية ، وهو يضمن التوصيف الميكانيكي ـ الكماتي الكامل للنظام . وبتعليل موجز ، تبيّن أنه من المُستحسَن أن تكون الدالة الموجية عقدية أكثر من كونها حقيقية . ثم جرى النظر في فكرة الدالة الموجية لتراكب عدة من أمواج ، وتم تبيانها في حالة الأمواج المستوية كما تم تبيان التناسق في الشكلانية الموجية من خلال النظر في الانكسار ، الذي يحصل لتيار من الجُسَيْمات أثناء انتقالها من منطقة ذات طاقة كامنة ثابتة إلى منطقة أخرى طاقتها الكامنة ثابتة أيضاً ومغايرة لها بالقيمة . وعلى نحو تقريبي كمياً ، وبوساطة عدة من أمثلة ،جرت مناقشة مبدأ عدم التحديد ، المتصل بالقيود المفروضة على دقة القياس المتزامن لكل زوج من أزواج الكميات المُتمِّمَة لبعضها بعضاً . وأخيراً ، عُولج تشكيل دالات موجية مركزة بوساطة تراكب أمواج مستوية ضمن رُزيمات موجية ، ونوقش التناسب بين حركة رزيمة موجية كهذه وحركة جُسَيْم كلاسيكي .

مسائل

2–1 أ) احسبْ مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين مفترضاً أن الالكترون يدور في مدارات دائرية حول النواة حيث أن محيط المدار يساوي عدداًصحيحاً من أطوال موجة دي برولي . ب) بعدها ، احسبْ تردد الاشعاع المنبعث حين انتقال الذرة من الحالة $n + 1$ إلى الحالة n اعتماداًعلى التعبير الذي حصلْتَ عليه لأجل E_n ، مع العلم أن :

$$f = \frac{E_{n+1} - E_n}{h}$$

جـ) بيِّن أن هذا التردد في حالة النهاية العليا للأعداد الكمية الكبيرة مطابق لنفس التردد الكلاسيكي للالكترون الذي يتمتع بطاقة E_n ويتحرك حول النواة .

2–2 انطلاقاً من مبدأ عدم التحديد ، قدِّر الزمن ، الذي يستغرقه توازن قلم الرصاص العادي في وضع عمودي على رأسه .

الفصـل الثالـث

معادلة شرودينغـر

3–1 معادلة الحركة للدالة الموجية .

تم في الفصل السابق إدخال مفهوم الدالة الموجية في ميكانيك الكم وجرت مناقشة موجزة لعلاقة هذا المفهوم بمسألة الازدواجية الموجية ـ الجُسَيْمية في الميكانيك الكلاسيكي . وهكذا طُرِحَتْ وجهة النظر الميكانيكية ـ الكماتية في المسألة ، لكنه لم تجرِ إعارة الاهتمام بعد لـ « قوانين الحركة » في ميكانيك الكم ، التي تحدد التبعية الزمنية للدالة الموجية . إن الهدف من هذا الفصل هو تبيان كيف أن المقارنة الكلاسيكية ، بالإضافة إلى حجج من نمط تلك التي استخدمناها سابقاً ، تقدِّم شكلاً لقوانين الحركة في ميكانيك الكم .

بما أن قوانين حركة كل من الجُسَيْمات والأمواج في الميكانيك الكلاسيكي يمكن التعبير عنها على العموم بمعادلات تفاضلية من الدرجة الثانية فمن الطبيعي أن يتم البحث عن معادلة تفاضلية (موجية) مناسبة من الدرجة الثانية ، بحيث تكون الدالة :

$$\psi = A \exp\left(i \frac{p \cdot r}{\hbar} - i \frac{Et}{\hbar}\right) \qquad (3-1)$$

حلاً لها في حالة جُسَيْم يتحـــــــرك عبر منطقة ذات طاقة كامنة ثابتة . ويجب أن يتوقع المرء أن تكون الطاقة الكامنة والكتلة بمثابة مَعْلَمين خارجيين يعطيان سلفاً في المعادلة التفاضلية ـ معادلة الحركة المنشودة. ومن ناحية أخرى وكما في حالة الميكانيك الكلاسيكي ، لايتوجب على المرء توقُّع أن تتضمن معادلة الحركة زخم الجُسَيْم أو طاقته بالشكل الواضح ، لأن هذه المقادير تختلف ـ على العموم ـ بين حل وآخر ، بينما يتوجب على المعادلة الموجية المنشودة أن تكون صالحة لصنف كامل من الحلول . إن العلاقات العامة بين الطاقة الإجمالية للجُسَيْم وطاقته الحركية وطاقته الكامنة تُمكننا من كتابة معادلة تستجيب لهذه المتطلبات .

لنأخذ أولاً تطبيق مؤثر لابلاس في دالة الموجة المستوية المعطاة بالمعادلة (1−3):

$$\nabla^2\psi \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \qquad (3-2)$$

وعلى نحو مماثل ، فإن اشتقاق المعادلة (1−3) يؤدي إلى :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi \qquad (3-3)$$

بينما يمكن كتابة الطاقة الاجمالية بمثابة مجموع الطاقتين الحركية والكامنة (الثابتة) :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \qquad (3-4)$$

إن الجمع بين هذه المعادلات من شأنه أن يعطينا المعادلة التفاضلية التالية :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (3-5)$$

ومن الغريب إلى حد كبير أن تكون هذه المعادلة بالنسبة للزمن من الدرجة الأولى وليس من الدرجة الثانية .

وعلى الرغم من أننا بيّنا أن الحلول ، التي تحقق هذه المعادلة هي حلول من الشكل الوارد في المعادلة (1−3) ، إلا أنه يتضح من الصفة الخطية التي تتمتع بها المعادلة (5−3)، أن التركيب الخطي لدالات من الطراز (1−3) من شأنه أيضاً أن يشكل حلاً لها ، وإنه لمن المعقول ـ وكما سيتبين من المناقشة التي تلي هنا ـ أن نفترض كون المعادلة (5−3) صالحة ليس فقط للجسيمات الحرة بل وللجسيمات التي تتأثر بمجال قوى محافظة.وفي مثل هذه الحالة ، يُفترض أن تبقى المعادلة (5−3) سارية المفعول حين تكون V دالة للموضع .

بإمكان المعادلة (5−3)، عموماً حيازة عدد كبير من الحلول ، ولكن ،وبما أنه يجب على هذه الحلول أن تتمتع بتفسير فيزيائي بوصفها سعات الاحتمالية، وكما نوقش أعلاه ، فإن طرازاً محدداً بين تلك الحلول الممكنة رياضياً هو فقط الحل المقبول من الناحية الفيزيائية . إن الدالة التي يمكن أن تكون ملائمة من الناحية الفيزيائية يجب أن

تكون دالة وحيدة القيمة بالنسبة للموضع وأن تكون منتهية في كل مكان . وعلاوة على ذلك إذا أعطي السلوك الفراغي والزمني للكمون V (المنتهي) وأعطيت قيمة الدالة الموجية مع قيم مشتقاتها عند سطح ما ، يصبح بالإمكان مكاملة المعادلة السابقة للحصول على الدالة ψ وعلى تدرجها $\nabla\psi$ في كل نقطة من الفراغ . مع العلم أن ψ ومشتقتها الأولى هما دالتان متصلتان .

وفضلاً عن ذلك ، إذا طلبنا أن يجري تفسير $|\psi|^2$ على أنه كثافة الاحتمالية بدلاً من كونه كثافة الاحتمالية النسبية فإن الدالة ψ يجب أن تكون ذات مربع قابل للمكاملة ، أي أن التكامل $\int|\psi|^2 d\tau$ يجب أن يُوجد . واذا كانت قيمة هذا التكامل تساوي الواحد ، فإن الدالة الموجية تسمى مستنظمة . ويمكن في هذه الحالة قراءة الكمية $|\psi|^2$ بشكل مباشر على أنها الكثافة الفراغية لاحتمالية الجُسيم .

لقد لاحظنا أن المعادلة (5—3) خطية ، ولذا فإن أي حل لها يمكن أن يعطي حلاً آخر بعد ضربه بثابت . وإذا كانت الدالة ذات مربع قابل للمكاملة ، يمكن اختيار الثابت المذكور لاستنظام الدالة الموجية . ومن الواضح أن مسألة الاستنظام لايمكن أن تكون عميقة المغزى ، ففي الواقع ، لايتغير المدلول الفيزيائي للدالة الموجية فيماإذا ضربناها بأي عدد عقدي .

ورغم وجود اعتبارات جدية للاعتقاد بأن الدالة الموجية ، التي تتمتع بمدلول فيزيائي هي دالة مستمرة بذاتها وكذلك مشتقتها الأولى ، وهي مقيدة وذات مربع قابل للمكاملة ، فكثيراً ماستظهر حالات معينة يتعرض فيها للتخفيف واحد أو أكثر من هذه الشروط ، بغرض التسهيل الرياضي . وقد التقينا للتو مثالاًعلى ذلك : ليس مربع الدالة المُوجية ، التي تمثل جسيماً ذا زخم محدد ، قابلاً للمكاملة . فهذه صورة مثالية ، لأن القيم المعروفة بدقة لاتظهر في الواقع ، ثم إنه من الواضح أن الجسيم الذي يمكن العثور عليه ، باحتمالية متساوية ، في كل مكان ، هو صورة مثالية للحالة ، التي يكون موضع الجسيم فيها غير محدد وضمن المقاييس المجهرية .

لاتضم المعادلة (5—3) حدوداً تحتوي على زخم الجسيم أو طاقته ، ولكنها تتضمن كتلة الجسيم وطاقته الكامنة . ومن الواضح أن الموجة المستوية في المعادلة (1—3) هي حل . والأكثر من ذلك ، إذا ماعدنا إلى المسألة ، التي نُوقشت في الفصل السابق حيث كانت الطاقة الكامنة تتخذ قيمتين مختلفتين في منطقتين مختلفتين من الفراغ ، سنجد أن النتائج ذاتها ، التي تم الحصول عليها سابقاً ، يمكن استخلاصها من

المعادلة (3-5) أيضاً ، بعدأن نفترض كون ψ ومشتقاتها دالات متصلة عبر التخم الفاصل بين المنطقتين ، حيث الطاقة الكامنة (الثابتة) مختلفة . ونظراً لأن أية دالة كمونية متصلة التغير يمكن تقريبها إلى سلسلة من الدالات المدرجة ، التي يكون الكمون عند كل درجة من درجاتها ثابتاً ، فإن صلاحية الحل في هذا المثال الخاص تطرح إمكان أن تكون المعادلة (3-5) صالحة حين تكون الطاقة الكامنة دالة متصلة تابعة لموضع الجسيم . إن المعادلة(3-5) ، المعروفة باسممعادلة شرودينغر تم اكتشافها من قبله في عام 1926(*) . وكما نوهنا أيضاً ، فإن هذه المعادلة هي فقط معادلة من الدرجة الأولى بالنسبة للزمن ، في حين أن المعادلات الموجية التي نصادفها في الفيزياء الكلاسيكية ، مثل : معادلات الأمواج الكهرمغنطيسية أو الأمواج الصوتية ، هي معادلات من الدرجة الثانية بالنسبة للزمن .

إن التعبير الواقع بين قوسين في الطرف الأيسر من المعادلة (3-5) يمكن عده مؤثراً يؤثر في الدالة الموجية ψ وإذا رمزنا لهذا المؤثر بالرمز H (حيث مدلوله الفيزيائي سيتضح لاحقاً) ، يمكن كتابة المعادلة على الشكل التالي :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \tag{3-6}$$

وهذه معادلة تفاضلية جزئية تتضمن أربعة متغيرات ، هي الإحداثيات الثلاثة لموضع الجسيم ، يضاف إليها الزمن ، وهي متغيرات منفصلة حينما لاتكون الطاقة الكامنة دالة زمنية . وفي مثل حالة كهذه وبغية فصل الجزء التابع زمنياً في المعادلة التفاضلية سنكتب ψ على الشكل التالي :

$$\psi = u(x, y, z)v(t) \tag{3-7}$$

وبعد تعويض هذا التعبير في المعادلة (3-5) وقسمتها على $u(x, y, z)v(t)$

(*) ظهرت معادلة شرودينغر ، بشكلها الوارد في المعادلة *(3-5)* في المقالة الرابعة من سلسلة مقالات تحت عنوان :

«Quantisierung als Eigenwertproblem». كانت المقالات الأولى في هذه السلسلة تتعلق بالنُظُم المحافظة وتهتم بمعادلة شرودينغر في شكلها المستقل زمنياً ، والذي سنوليه الاهتمام لاحقاً (المعادلة *3-10*) . ويمكن العثور على هذه المقالات الأربع الهامة في :
Ann, Physik 79, 361 (1926), 79, 489 (1926), 80, 437 (1926); and 81, 109 (1926).

نحصل على :

$$\frac{1}{u(x, y, z)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x, y, z)\right]u(x, y, z) = i\hbar\frac{1}{v(t)}\frac{\partial}{\partial t}v(t) = E \qquad (3-8)$$

إن الطرف الأيسر من هذه المعادلة هو دالة فقط للإحداثيات x, y, z والطرف الأيمن هو دالة فقط للزمن t.وبالتالي ، طالما أن هذه المتغيرات الأربعة مستقلة ، فإن كلا من طرفي المعادلة (8−3) يجب أن يساوي ثابتاً ، سنرمز له بالرمز E .

وتقود عملية الحل بالنسبة للجزء التابع زمنياً من المعادلة (8−3) إلى مايلي :

$$v(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \qquad (3-9)$$

وإنه لمن الواضح لماذا يبدو ملائماًأن يُرمَزإلى الثابت ، الذي له قياس الطاقة بالرمز E إذا ماقورنت هذه المعادلة مع تلك الخاصة بالموجة المستوية ، أي (1−3): فالرمز E يشير إلى طاقة الجسيم الذي يتم توصيفه بهذا الحل ، والذي يلبي معادلة شرودينغر . أما الجزء التابع للموضع فيصبح كالآتي :

$$\mathrm{H}u(x, y, z) = Eu(x, y, z) \qquad (3-10)$$

تتمتع هذه المعادلة التفاضلية بشكل مماثل لما يسمى معادلة القيمة المميزةحيث الثابت E هو القيمة المميزة . إن المعادلة (10−3)في حالة الجسيمات المقيدة (أي المتركزة في ، او المحصورة ضمن منطقة محدودة من الفراغ ، بوساطة بئر كمونية أو صندوق كموني من نوع ما) ، تملك على العموم حلولاً مقبولة فقط لأجل بعض من قيم E كما سنرى ذلك لاحقاً . وقيم E هذه هي الطاقات الممكنة بالنسبة للنظام قيد الدراسة . وهكذا فقد تم إدغام عملية التكمية وازدواجية الموجة ـ الجسيم في الهيكل الفعلي لميكانيك الكم .

يجري في نظرية المعادلات التفاضلية الجزئية البرهان على أن الحل الأكثر عمومية والمقبول فيزيائياً بين حلول المعادلة (6−3) يمكن كتابته بمثابة تراكب حلول لها شكل المعادلة (7−3). وبالتالي ، فإن حل معادلة شرودينغر الأكثر عمومية ، في حال الطاقة الكامنة V المستقلة زمنياً ، يمكن تدوينه بالشكل الآتي:

$$\psi = \sum_E c_E \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)u_E(x, y, z) \qquad (3-11)$$

حيث c_E ثوابت تحددها الشروط المفروضة على النظام .

تقدم هذه المعادلة مثالاً آخر على فكرة التراكب التي اصطدمنا بها سابقاً فيما يتعلق بزخم الجسيم الحر . فلقد رأينا هناك أنه إذا كانت الدالة الموجية مجموعاً لموجتين مستويتين ، فإنها تمثل الجسيم ، الذي تكون نتيجة القياس بالنسبة لزخمه غير محددة . وبإمكان مثل هذا القياس أن يسفر عن واحدة من قيمتي الزخم الموافقتين ، ولكن واحدة منها محددة فقط على نحو احتمالي وبمعنى ما ، يمكن أن نعد أن مثل هذه الدالة الموجية تمثل حالة الجسيم حينما يملك زخمين مختلفين في وقتٍ واحد .

تُقدِّم المعادلة (3−11) الفكرة ذاتها فيما يتعلق بالطاقة . فكل من حدود المجموع يمثل دالة موجية هي تراكب حالات طاقية مختلفة : إذا كان يجري قياس الطاقة ، فإن ماسيقاس هو طاقة إحدى الحالات المتمثلة بالحدود والتي يضمها المجموع . ولكن أية واحدة منها ستكون هذه الحالة ؟ فهذا مايمكن التنبؤ به فقط بطريقة احتمالية.ويمكن للمرء بالمقارنة مع الحجج السابقة التي تتعلق بالزخم توقُّع أن تكون $|c_E|^2$ هي مقياس لاحتمالية الحصول على النتيجة E إذا ماتم قياس الطاقة . وما يمنح هذا التوقع معقولية إضافية عد المربع المطلق للمعادلة(3−11) قابلاً للمكاملة على كامل الفراغ . إن المفترض هو أن تكون الدالات ψ و u_E مستنظمة . وبالإمكان كتابة التكامل الناتج كمايلي :

$$1 = \int |\psi|^2 dv = \sum_{E,E'} \overline{c_E} c_{E'} \exp\left[\frac{i(E' - E)t}{\hbar}\right] \int \overline{u_E} u_{E'}\, dv$$
$$= \sum_E |c_E|^2, \qquad (3-12)$$

لأن كل هذه التكاملات تساوي الصفر عندما $E \neq E'$ كما سنبين في الفصل السادس . وللتبسيط افترضنا أن جيمع الطاقات E في المعادلة (3−12)مختلفة فيما بينها . وأن التكامل التربيعي لـ ψ يساوي الواحد ، وتلك هي احتمالية العثور على الجسيم في مكان ما من الفراغ . وهذا يساوي المجموع ، الذي يمكن تفسيره كمجموع احتماليات العثور على الجسيم في مختلف الحالات الطاقية .

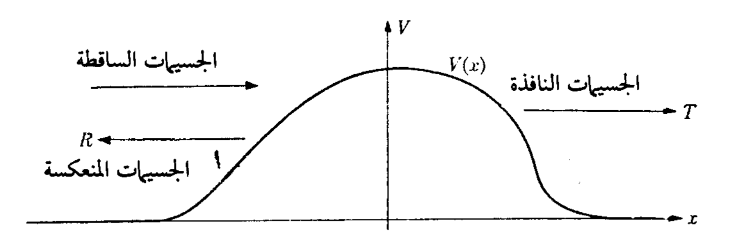
3−2 الحركة وحيدة البعدإلى خلف حاجز كموني .

إن أبسط حلول معادلة شرودينغر هي تلك التي تخص المسائل المتعلقة بحركة الجسيم في بعد واحد . وهذا ماعنيناه بالقول إن الطاقة الكامنة V في المعادلة (3−5)

هي دالة لإحداثي واحد ، هو x مثلاً ، وعندئذ تكون حركة الجسيم في الاتجاهين yو z هي حركة جسيم حر بالامكان تجاهلها بقصد التبسيط . وإذا تم تجاهل الحركة في كل من الاتجاهين y و zفإن المؤثر H، والذي يسمىمؤثر هاملتون يتخذ الشكل التالي :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \qquad (3-13)$$

إن حركات الجسيم في بعد واحد يمكن تقسيمها ، بشكل طبيعي إلى ثلاثة أصناف وذلك تبعاً لشكل دالة الطاقة الكامنة $V(x)$.



الشكل $1-3$: حاجز كموني ذو طابع عام

في الصنف الأول ، الذي يمكن تسميته الحركة إلى ماوراء حاجز كموني ، تكون الطاقة الكامنة للجسيم دالة للموضع وتملك شكلاً عاماً ممثلاًبالمنحني الشكل $(1-3)$. أما دالة الطاقة الكامنة في هذه الحالة ، فلها شكل حاجز كموني بحيث أن القوى تساوي الصفر في جميع الأمكنة ماعدا منطقة محددة من الفراغ مطابقة للحاجز ذاته . وفي هذا الصنف من المسائل يفترض المرء ـ عادةً ـ أن الموجة تسقط على حاجز كموني من اليمين أو من اليسار مع عبور بعض الجسيمات إلى ماوراء الحاجز وانعكاس المتبقيات منها إلى الخلف . ويجب أن يقاس تدفق الجسيمات الساقطة بنوع من الوحدات المناسبة . فمثلاً : يجب أن يكون التدفق الواحدي متمثلاً بسقوط جسيم واحد خلال الثانية الواحدة بزخم محدد على الحاجز الكموني . أما شدة الموجة المنعكسة R وشدة الموجة النافذة T في الشكل $(1-3)$ ، فترمزان ، على الترتيب ، إلى عدد الجسيمات المنعكسة وعدد الجسيمات النافذة خلال الثانية في ظل تدفق للجسيمات الساقطة يساوي الواحد . ويوجد عدد من النقاط الرياضية والفيزيائية التي

يجب ملاحظتها بصدد هذا الصنف من المسائل . فقبل كل شيء ، يتصف أي حل بأربعة معالم ، بينها اثنان فقط لهما مدلول فيزيائي ، وهما يجب أن يأخذا شكل عددَيْن عقديَّين يمثلان سعة وطور الأمواج الساقطة على الحاجز الكموني من اليسار ومن اليمين على حد سواء . ومن ناحية أخرى ، وبماأننا نتعامل مع نظرية خطية فمن الممكن معالجة كل من هاتين الموجتين الساقطتين على حدة . لذا ، ودون فقدان العمومية ، يمكن اختزال المسألة إلى مسألة ذات مَعْلَمَيْن اثنين لموجة واحدة تسقط على الكمون ، الذي يسبب التبعثر . ويمكن ، في حالة الضرورة تكوين تراكب من حلول هذه المسألة البسيطة لتلبية شروط ما في حالة أكثر عمومية .

إن النقطة الهامة هنا ، تكمن في امكان الحصول على حلول ذات مدلول فيزيائي لأجل أية قيمة ايجابية لطاقة الجسيم . أما المشكلة اللاحقة ذات الإثارة والأهمية الفيزيائية الكبيرة ، فهي أنه حتى إذا كان اجمالي طاقة الجسيم أقل من العلو الأقصى للحاجز الكموني ، توجد هنالك موجة نافذة . وهذا موقف لايوجد أي شبيه كلاسيكي له ، يتعلق بالجسيمات التي « تشق نفقاً » لتعبر الحاجز دون « الصعود إلى القمة » . فمن وجهة النظر الكلاسيكية ، لايجدر بالمرء أبداً أن يُقِّر بوجود الجسيم في منطقة كانت طاقتها الكامنة أكبر من طاقته الاجمالية ، لأن ذلك من شأنه أن يؤدي إلى طاقة حركية سالبة ، وهذا مفهوم لايحمل معنى فيزيائياً . وإن الاستنتاج الفيزيائي من هذا التناقض سوف يُناقَش في الفصل الثامن . .

إن الاختراقات الكمونية من هذا النوع هامة بالنسبة للفيزياء النووية ، وعلى سبيل المثال ، بالنسبة لاضمحلال جُسَيْمات أَلْفا من النوى المشعة ففي هذه الحالة يجب على جُسَيْم أَلْفا أن يتنقل عبر حاجز كموني من الطاقة الكولومية (الناتجة عن التفاعل بين جُسَيْم ألفا المشحون والنواة المشحونة) وهذا الحاجز أعلى ـ عند حافة النواة ـ من الطاقة الإجمالية لجُسَيْم ألفا (وهذه المسألة المحددة ستعالج بالتفصيل في الفصل الرابع عشر) .

لنأخذ ـ مثلاً ـ الحاجز الكموني البسيط المرسوم في الشكل (3−2) ، حيث الطاقة الكامنة V ثابت (موجب) في منطقة $a \leq x \leq a$ وتساوي الصفر خارج هذه المنطقة . ويُفترض أن الجُسَيْمات تسقط على الحاجز الكموني فقط من اليسار ، وأنه توجد موجة منعكسة وموجة نافذة . كما يفترض ، لاحقاً أن طاقة الجسيم أقل من V ، بحيث أن أي جسيم عابر يجب توصيفه كنتيجة لاختراق الحاجز .

إن الكمون في الشكل (3–2) قد اختير ليكون متناظراً حول المحور $x = 0$:

$$V(x) = V(-x) \tag{3-14}$$

ونظراً لأن المشتقة الثانية لها طابع شفعي إزاء x ، فإن مؤثر هاملتون H في الطرف الأيسر من المعادلة (3–13) لايتغير في حال استبدال x بـ $-x$. وبالتالي إذا كانت $u(x)$ حلاً للمعادلة (3–10) ، فإن هذا الاستبدال البسيط يؤدي إلى :

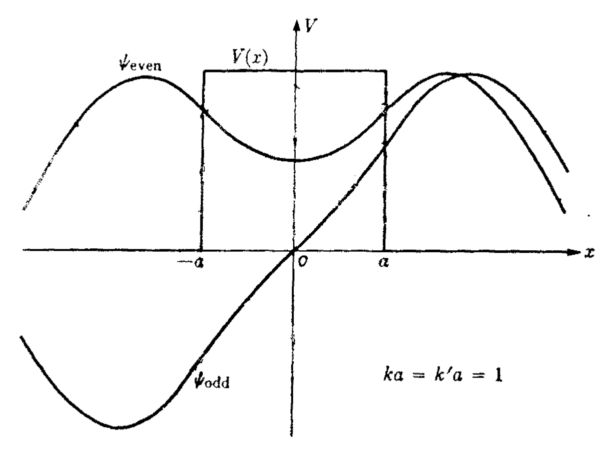
$$\mathrm{H}u(-x) = Eu(-x) \tag{3-15}$$

عندئذ ، تكون $u(-x)$ و $u(x)$ كلتاهما حلين لمعادلة القيمة المميزة (3–10) ، لهما القيمة المميزة E نفسها.وبناء على ذلك ، فإن أي تركيب خطي هو أيضاً حل،وعلى نحو خاص ، فإن التراكيب الشفعية والوترية

$$\mathrm{H}[u(x) \pm u(-x)] = E[u(x) \pm u(-x)] \tag{3-16}$$

هي حلول . إن حلول المعادلة (3–10) التي يمكن ، على أساس (3–13) ، كتابتها بالشكل

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]u \tag{3-17}$$



الشكل $3-2$: حاجز كموني مستطيل وحيد البعد ، مع تمثيل للدالتَيْن الموجيّتين ، الشفعية *(even)* والوترية *(odd)* ، المرافقتين لهذا الحاجز .

يجوز بالتالي ، اختيارها بحيث تكون إما شفعيةأو وترية بالنسبة لـ x دون فقدان العمومية . والدالة التي بين قوسين في المعادلة (16–3) يجب أن تكون صفراً . فمثلاً : إذا كانت $u(x)$ دالة شفعية بالنسبة لـ x ، فإن التركيب الوتري في المعادلة (16–3) مطابق للصفر . وإن اختيار الكمون الذي يبدو في الشكل (3–2)متناظراً ، قد جرى بغية تبسيط المناقشة حول الطبيعة الكمية للحلول ، فالمسائل التي تُصادف في الممارسة العملية لن تملك هذا التناظر المحدد بشكل إلزامي .

وبماان الطاقة الكامنة دالة شفعية بالنسبة لـ x ، فبإمكان المرء ، وكما أشير سابقاً ، أن يختار الحلول لمعادلة القيمة المميزة للطاقة ، بحيث تكون دائماً شفعية أو وترية . ويتم تبسيط المسألة ، نوعاً ما ، إذا تم النظر ، بالتالي ، في حلول شفعيةأو وترية للمعادلة التفاضلية . لنأخذ أولاً الحلول الشفعية : فالدالة الموجية u ، التي هي حل للمعادلة (17–3) ، يمكن كتابتها للمناطق الثلاث بالنسبة لـ x ، على النحو التالي :

$$\begin{aligned} u &= A_1 \cosh k'x, && -a < x < a, \\ &= B_1 \cos(kx - \delta_1), && x > a, \\ &= B_1 \cos(kx + \delta_1), && x < -a \end{aligned} \qquad (3-18)$$

حيث k و k' يعطيان بالعلاقتين التاليتين :

$$\begin{aligned} k' &= \frac{1}{\hbar}[2m(V - E)]^{1/2}, \qquad E < V, \\ k &= \frac{1}{\hbar}[2mE]^{1/2} \end{aligned} \qquad (3-19)$$

لنلاحظ أن الدالة الشفعية U في المنطقة الممتدة بين $(-a)$ وa هي جيب تمام زائدي . وأن الدالات في المنطقة $-a > a <$ $x < -a$ و $x > a$ هي ايضاً شفعية .

يجب اختيار الثابتين A_1 , B_1 ، بحيث يتم وصل هذه التعابير على نحو ملائم عند التخمين a , $-a$ دالات متصلة . إذا كانت u ومشتقتها الأولى متصلتين في النقطتين $x = a$ و $x = -a$، فإن المشتقة اللوغارتمية :

$$\frac{d}{dx}(\log u) = \frac{1}{u}\frac{du}{dx} \qquad (3-20)$$

ستكون متصلة أيضاً . وإن اتصال المشتقة اللوغارتمية بالنسبة لـ x في النقطة $x = a$ يعطينا :

$$\frac{1}{u}\frac{du}{dx} = k' \tanh (k'a) = -k \tan (ka - \delta_1) \qquad (3-21)$$

وإذا افترضنا أن :

$$ka \ll k'a \ll 1 \qquad (3-22)$$

فإن المعادلة (21-3) تصبح بعد تبسيطها كالآتي :

$$\delta_1 = \frac{k^2 + k'^2}{k} a = \frac{V}{E} ka \qquad (3-23)$$

ويمكن على نحو مماثل كتابة الحل الوتري للمعادلة التفاضلية كالتالي :

$$\begin{aligned} u &= A_2 \sinh k'x, && -a < x < a, \\ &= B_2 \sin (kx - \delta_2), && x > a, \\ &= B_2 \sin (kx + \delta_2), && x < -a \end{aligned} \qquad (3-24)$$

إن اتصال المشتقة اللوغارتمية يعطي هنا :

$$\frac{1}{u}\frac{du}{dx} = k' \coth (k'a) = k \cot (ka - \delta_2) \qquad (3-25)$$

وهذا مايمكن كتابته على الشكل التالي :

$$k \tanh (k'a) = k' \tan (ka - \delta_2) \qquad (3-26)$$

وإذا نحن اعتمدنا ، مرة أخرى افتراضات المعادلة (22-3) ، فستكون النتيجة هي :

$$\delta_2 = 0 \qquad (3-27)$$

إن الدالتين الموجيتين للمعادلة (18-3) والمعادلة (24-3)مبينتان في الشكل (2-3) لأجل قيم تمثيلية لطاقة الجسيم وارتفاع الحاجز الكموني .

وبفضل الاختيار الملائم للثابتين B_2, B_1 في المعادلتين (18-3) و(24-3) ، يمكن بناء الحل الشفعي والحل الوتري بطريقة تجعل سعتي الموجتين الساقطتين من الجانبين الأيسر والأيمن متساويتين . وعندها ، يمكن مراكبة هذين الحلين بطريقة تصبح معها سعة الموجة الساقطة من اليمين صفراً ، بحيث أن الأمواج تسقط فقط من

اليسار . ففي هذه الحالة ، تعطي الحلول ، وبشكل مباشر ، سعة كل من الموجتين النافذة والمنعكسة . فمراكبة الحلين الشفعي والوتري بالنسبة لـ $x > a$ تعطينا :

$$u = B_1 \cos (kx + \delta_1) + B_2 \sin kx \tag{3-28}$$

وإذا تذكرنا أنه في تلك المنطقة توجد فقط الموجة النافذة من الجهة اليمنى ، سنجد أن هذه الموجة يجب أن تتخذ شكل القسم الفراغي من الموجة المستوية :

$$u = C \exp (ikx) \tag{3-29}$$

ومن خلال دمج هاتين المعادلتين يمكن أن نستخلص :

$$B_1 \exp (i\delta_1) + iB_2 = 0 \tag{3-30}$$

و

$$C = \tfrac{1}{2}[B_1 \exp (-i\delta_1) - iB_2] \tag{3-31}$$

أما دمج هاتين المعادلتين فيؤدي بدوره إلى :

$$C = B_1 \cos \delta_1 \tag{3-32}$$

تتخذ الدالة الموجية في منطقة $x < -a$ الشكل الآتي:

$$u = \left[\tfrac{1}{2}B_1 \exp (i\delta_1) - \frac{i}{2} B_2\right] \exp (ikx) + \left[\tfrac{1}{2}B_1 \exp (-i\delta_1) + \frac{i}{2} B_2\right] \exp (-ikx) \tag{3-33}$$

حيث الحد الأول يمثل الموجة الساقطة والثاني الموجة المنعكسة . وحين يتم تعويض المعادلة (3-30) في هذه المعادلة نحصل على :

$$u = -iB_2 \exp (ikx) + \tfrac{1}{2}B_1 [\exp (-i\delta_1) - \exp (i\delta_1)] \exp (-ikx), \quad x < -a \tag{3-34}$$

وإذا افترضنا أن سعة الموجة الساقطة من اليسار تساوي الواحد ، فيجب اختيار B_2 ، بحيث يكون $B_2 = i$ ، وهذا مايعطينا $B_1 = \exp (-i\delta_1)$ ، وكذلك

$$\begin{aligned} u &= \exp (ikx) - i \exp (-i\delta_1) \sin \delta_1 \exp (-ikx), & x < -a, \\ &= \exp (-i\delta_1) & x > a \end{aligned} \tag{3-35}$$

نجد في هذه التعابير أن كلاً من سعة الموجة النافذة وسعة الموجة المنعكسة تعطيان مباشرة بلغة « انزياح الطور » δ_1 . فاحتمال أن الجُسَيْم سوف يعبر الحاجز يتمثل بمربع القيمة المطلقة لسعة الموجة النافذة :

$$T = \cos^2 \delta_1 = \frac{1}{1 + \tan^2 \delta_1} = \frac{1}{1 + (V^2/E) \cdot 2ma^2/\hbar^2} \quad (3-36)$$

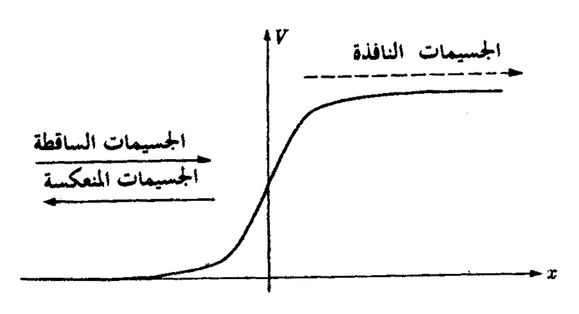
ومن خلال تقريب الكمون r−1 إلى كمون تربيعي مكافىء ، وبعد تطبيق النتائج المستخلَصة أعلاه ، يمكن استخدام هذه المعادلة للحصول على تقدير تقريبي لاحتمالية انفلات جسيم ألفا من النواة مخترقاً الحاجز الكموني للمجال الكهرساكن الكولومي للنواة . وسوف تجرى حسابات أكثر دقة فيها بعد (انظر الفصل الرابع عشر) .

لقد اكتفينا أعلاه بمعالجة حالة الجُسَيْمات متدنية الطاقة فقط . ولكن تأثيراً ملفتاً للاهتمام يظهر حين تكون طاقة الجسيمات أكبر من الحد الأعظمي V_m لطاقة كمون التبعثر . ففي هذه الحالة ، يبين حل معادلة شرودينغر ، وعلى عكس التوقعات الكلاسيكية ، وجود احتمالية محددة لأن يتم انعكاس الموجة الساقطة ، وهذا ماسنناقشه لاحقاً ، بعد النظر في صنف آخر من المسائل .

3−3 الحركة أحادية البعد : الانعكاس عن حاجز لانهائي في العرض :

يتعلق الصنف الثاني من الحركات أحادية الجانب بانعكاس الجسيمات عن حاجز كموني كما هو مبين في الشكل (3−3)، ففي هذه الحالة ، وحين تسقط الجُسَيْمات على الحاجز الكموني من اليسار بطاقة أقل من الطاقة الكامنة في قمة الحاجز . يتم انعكاس اجمالي للجسيمات كما في الحالة الكلاسيكية وعندما تكون الطاقة أكبر من الطاقة الكامنة ، سوف توجد هنالك ،عموماً ، كلتا الموجتين النافذة والمنعكسة . ويمكن في هذا الصنف من المسائل ، وكما في ذلك الصنف الذي نوقش أعلاه ، العثور على حلول ذات مدلول فيزيائي لأجل أية طاقة ايجابية يتمتع بها الجسيم ، ولكن هذه الحلول بالنسبة للجُسَيْمات ذات الطاقة المتدنية ـ حيث الانعكاس إجمالي ـ سوف تتميز بنظام ذي مَعْلَمَيْن فقط . فالحل عندئذٍ ، يُعدُّ موصوفاً بمجرد أن يتم توصيف سعة وطور الموجة الساقطة على الحاجز من اليسار .

لنأخذ كمثال على الطراز الثاني من الكمون ، الحاجز الكموني المبين في الشكل



الشكل 3-3 : حاجز كموني وحيد البعد لانهائي في العرض بصيغته العامة .

(3-4) . إنه دالة للطاقة الكامنة تملك شكل عتبة بسيطة تظهر في النقطة x = o :

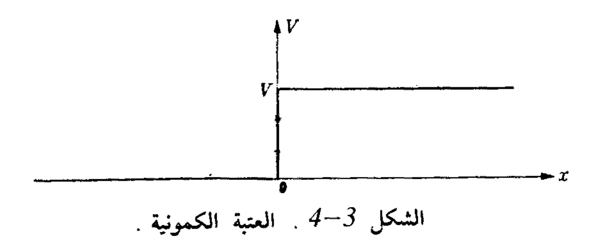
$$V(x) = 0, \qquad x < 0, \qquad = V > 0, \qquad x > 0 \tag{3-37}$$

لننظر ، أولاً في الحالة التي تكون الطاقة فيها أكبر من الطاقة الكامنة V ، لأجل قيم x الموجبة . من وجهة النظر الكلاسيكية تبدو جميع الجسيمات الساقطة في هذه الحالة قادرة على الانتقال المتواصل إلى اليمين . وإذا كانت الطاقة الإجمالية للجسيم في جميع الأماكن أكبر من الطاقة الكامنة ، فالحل الأكثر عمومية للمعادلة (17-3) لأجل قيم x السالبة يتمتع بالشكل التالي :

$$u = \exp[i(kx - \omega t)] + A \exp[-i(kx + \omega t)], \qquad x < 0,$$

$$k = \left[\frac{2mE}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \qquad \omega = \frac{E}{\hbar} \tag{3-38}$$

وهذا يوافق سقوط الجسيمات بتدفق واحدي . أما بالنسبة لقيم xالايجابية



الشكل 3-4 . العتبة الكمونية .

فشكل الحل هو :

$$u = B \exp [i(k'x - \omega t)], \qquad x > 0,$$
$$k' = \left[\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}\right]^{1/2} \tag{3-39}$$

وكما سبق ، يُفترَض أن الدالة ومشتقتها الأولى ـ وبالتالي ، المشتقة اللوغارتمية ـ متصلة على كامل المدى ، وعلى الجانب السالب من التخم الفاصل تتخذ المشتقة اللوغارتمية القيمة التالية :

$$\frac{1}{u}\frac{du}{dx} = \frac{ik(1 - A)}{1 + A}, \qquad x = -0. \tag{3-40}$$

أما على الجانب الموجب منه فتكون قيمتها :

$$\frac{1}{u}\frac{du}{dx} = ik', \qquad x = +0 \tag{3-41}$$

وعندئذٍ ، يتطلب اتصال المشتقة اللوغارتمية عبر التخم توافر الشرط التالي :

$$\frac{1 - A}{1 + A} = \frac{k'}{k} = \left[\frac{E - V}{E}\right]^{1/2} \tag{3-42}$$

وإذا حلينا هذه المعادلة بالنسبة لـ A نجد أن :

$$A = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V}} \tag{3-43}$$

يمثل مربَّع A شدة الموجة المنعكسة أو احتمالية أن يتم انعكاس الجسيم عن الحد الفاصل بين منطقتين تختلف طاقتهما الكامنة . لأجل المقارنة مع النتيجة الكلاسيكية ، يلزمنا فقطأن نتذكر أنه وفقاً للميكانيك الكلاسيكي لايجب أن يحدث انعكاس الجسيمات ويجب أن تكون A مساوية الصفر . وفي النهاية ، التي تكون E فيها أكبر بكثير من V ، يصح الأمر نفسه من وجهة نظر ميكانيك الكم .

لنأخذ ، بعد ذلك ، الحالة التي تكون طاقة الجسيم فيها أقل من ارتفاع الحاجز الكموني . فمن وجهة النظر الكلاسيكية ، تنعكس جميع الجسيمات في هذه الحالة

وعندها سيكون $\acute{K}$ الوارد في المعادلة (39—3) ، عدداً تخيلياً صرفاً بما يتفق مع الحلول ، التي تضمحل أُسياً باتجاه اليمين في منطقة x الموجبة ويصحُّ فقط الجذر التخيلي الموجب لـ K ، لأن الجذر السالب سيعني تزايد الحل أُسياً نحو اليمين ، وهذا غير جائز فيزيائياً ، لأنه يعني أن تدفق الجسيمات المغادرة لانهائي ، بينما تساوي شدة الجسيمات الساقطة الواحد . وباستثناء حالة مساواة $\acute{K}$ عدداً تخيلياً ، تبقى شكلانية الحل كما هي معروضة أعلاه ومن جديد تكون احتمالية الانعكاس معطاة من خلال مزبع المقدار A في المعادلة (43—3)، ولكن الجذر $\sqrt{E - V}$ في هذه المعادلة هو الآن تخيلي صرف ، والصورة هي المترافق العقدي للمخرج . وبالتالي ، فإن القيمة المطلقة لـ A هي الواحد ، مما يوافق انعكاس جميع الجسيمات ، وهذا ينسجم مع النتيجة الكلاسيكية في ظل هذه الشروط. ويبين الشكل (3—5) معامل الانعكاس /A/2 .

ثمة حالة تستحق النظر ، وهي حالة النهاية ، التي يمر فيها ارتفاع الحاجز الكموني V إلى اللانهاية ، فالتمحيص في المعادلة(43—3) يبين أن نهاية A ، عندماV يمر الى اللانهاية ، تساوي :

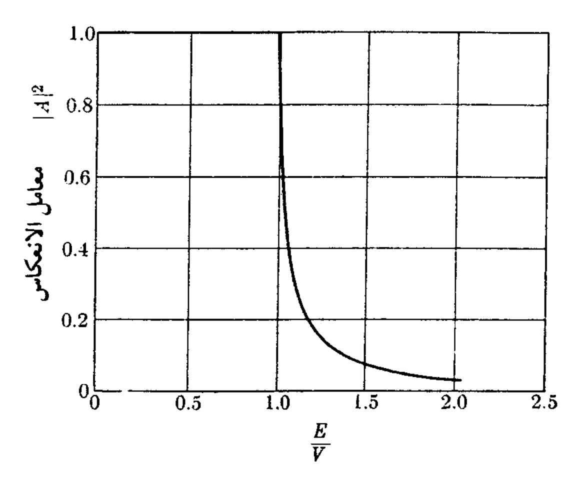
$$\lim_{V \to \infty} A = -1 \qquad (3-44)$$

وتعويض القيمة $A = -1$ في المعادلة (38—3) يقود إلى الشرط التالي :

$$u(0) = 0 \qquad (3-45)$$

وهذا مكافىء للتأكيد بأن الشرط ، الذي يجب تحققه عند أي تخم تكون الطاقة الكامنة عنده لانهائية ، هو اختفاء الدالة الموجية . فعلياً ، تم إثبات هذه النتيجة في حالة الحركة وحيدة البعد فقط ، لكنه يمكن تبيان صلاحيتها ، بشكل عام .

وجدنا في المسائل من كلا الصنفين اللذين نوقشا هنا ، أن بإمكان الحواجز الكمونية عكس الجسيمات التي تتمتع بطاقة كافية لتحقيق الانتقال كلاسيكياً . وهذا السلوك (الذي يبدو أكثر من غير متوقَّع) يملك ، رغم ذلك ، شبيهه الكلاسيكي ، والذي يتضح ، إذا تذكر المرء أن شكلانية ميكانيك الكم تعتمد السلوك شبه الموجي والسلوك شبه الجسيمي ، على حد سواء . ويمكن ، على سبيل المثال ، معالجة المسألة بالمقارنة مع البصريات الموجية الكلاسيكية ، كما سبق وفعلنا ذلك آنفاً في هذا الفصل ، حيث رأينا قانون سْنِل الكلاسيكي في البصريات الموجية يعطي نتائج مكافئة



الشكل 3-5. معامل الانعكاس للجُسَيْمات الساقطة على حاجز العتبة الكمونية . لاحظ أن بعض الجُسَيْمات التي تكفي طاقتها لتحقيق الانتقال كلاسيكياً ، يتم انعكاسها في حالة ميكانيك الكم .

لتلك ، التي حصلنا عليها ، انطلاقاًمن اعتبارات ميكانيك الكم . ويمكن لانعكاس الجسيمات ذات الطاقة Eعن حاجز كموني ارتفاعه $V < E$ أن يُقارَن بانعكاس الضوء من قبل وسط شفاف يختلف عن محيطه من حيث معامل الانكسار . وإذا كتبنا المعادلة (3-43) على شكل :

$$A = \frac{\sqrt{E/(E-V)} - 1}{\sqrt{E/(E-V)} + 1} \qquad (3-46)$$

واستخدمنا « معامل الانكسار » المعرَّف بالمعادلة (2-12) ، نحصل على :

$$A = \frac{n-1}{n+1} \qquad (3-47)$$

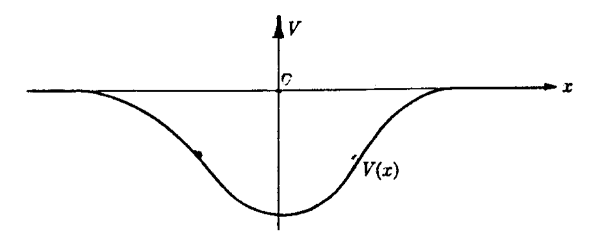
وهذا معامل الانعكاس الكلاسيكي لحد فاصل يتغير معامل الانكسار عبره على نحو مفاجىء . ويبين التحليل أنه إذا كان الكمون (أو معامل الانكسار) يتغير على شكل من التدريج الكافي ، بدلاً من التغير المفاجىء ، فإن مظاهر الانعكاس يمكن تجاهلها في كلتا الحالتين الكلاسيكية والكماتية .

3-4 الحركة أحادية البعد في بئر كمونية :

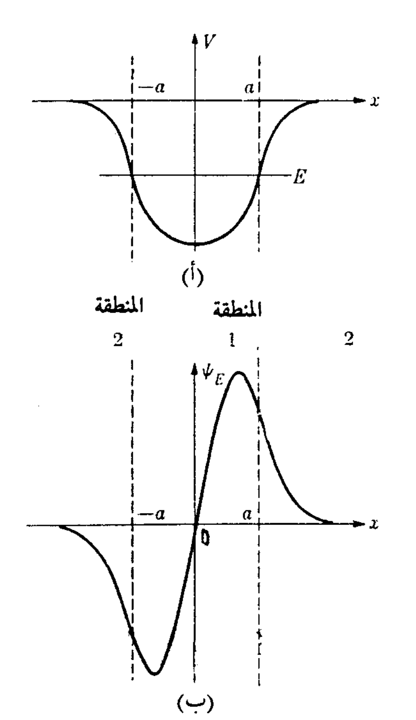
إن الصنف الثالث من الحركات ، التي ستناقَش هو صنف حركات الجسيم

المقيد في بئر كمونية . ففي هذه الحالة ، يكون لدالة الطاقة الكامنة صيغة عامة مبينة في الشكل (3—6) ، ويمكن للجسيم أن يوجد في حالات تتميز بطاقة إجمالية تكون سالبة وموجبة على حد سواء (اي أن بامكان معادلة شرودينغر أن تملك حلولاً في هذه الحالة) كلاسيكياً ، وفي حالات الطاقة السالبة ، يتذبذب الجسيم جيئة وذهاباً بين طرفَيْ البئر الكمونية ، ويمكن أن ينشأ موقف مشابه في ميكانيك الكم ، أي أن **الحلول المقيدة** ممكنة بالنسبة لمعادلة شرودينغر . وكما سنوضح أدناه . يمكن الحصول على مثل هذه الحلول المقيدة فقط لأجل قيم مميزة متقطعة من الطاقة السالبة في معادلة شرودينغر . وبالتالي ، توجد بنية من مستويات الطاقة المكماة لأجل الطاقات الممكنة بالنسبة للجسيم ، داخل البئر . ومن ناحية أخرى ، توجدأيضاً حلول لحالات الطاقة الموجبة بالنسبة للجسيم ، وهي تشبه تماماً الحلول في الصنف الأول من المسائل ، الذي وصفناه سابقاً وتحديداً في حالة تبعثر الجُسَيْمات الساقطة من جهة واحدة . ففي حالتنا هذه ، سوف تنعكس الجُسَيْمات جزئياً ، وكذلك سوف تعبر منطقة البئر الكمونية جزئياً . هنالك ،بالطبع ، فارق مميز بين هذا الطراز من السلوك والسلوك الكلاسيكي . ففي حالة النظام الكلاسيكي ، يتوجب على الجُسَيْم وبشكل محدد ، أن يجتاز البئر الكمونية ويخرج من طرفها الآخر . وبكلمات أخرى ، ستكون هنالك فقط جسيمات نافذة ، ولن تكون جسيمات منعكسة . أما في حالة ميكانيك الكم ، ونظراً للسلوك شبه الموجي لدى الجسيمات ، توجد جسيمات منعكسة كما توجد جسيمات نافذة .

سوف نناقش الآن الحالات المقيدة الممكنة للجسيم في بئر كمونية منطلقين من وجهة نظر نوعية ، لكي نرى لماذا يتميز هذا الصنف من الحلول بشبكة من القيم المميزة المتقطعة المحدودة للطاقة E . وعودةً إلى المعادلة (3—17) لنأخذ أولاً المنطقة التي طاقتها الكامنة أقل من الطاقة الاجمالية ، بحيث يصبح المعامل أمام u في الطرف الأيمن من المعادلة سلبياً . فالبنسبة لـ u الموجبة ستكون المشتقة الثانية سالبة . وبكلام آخر سيكون الحل من نوع يبدو معه الرسم البياني لـ u كدالة لـ x مقعّراً نحو الأسفل أو بإتجاه المحور . من جهة ثانية ، ستكون المشتقة الثانية لـ u السالبة موجبةً والحل سيكون ،مرة أخرى مقوساً نحو الأعلى باتجاه المحور . ولذا فإن الحل يتصف بطابع تذبذبي والتقوس فيه دائماً باتجاه المحور $u = o$ (انظر الشكل (3—7) ، منطقة 1) . وحيثما تكون V أكبر من E (المنطقة 2 في الشكل (3—7) ، يكون المعامِل أمام

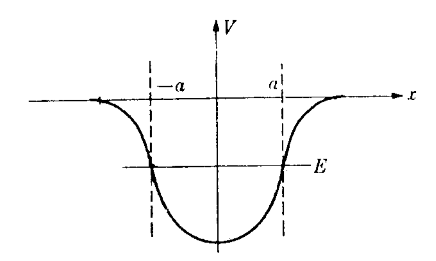


الشكل $3-6$: بئر كمونية عامة

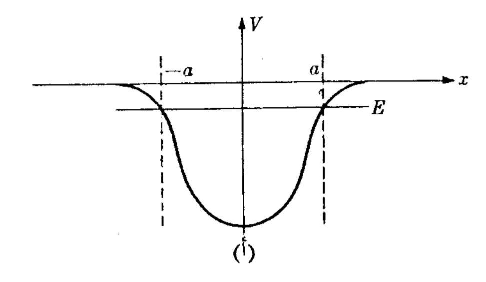


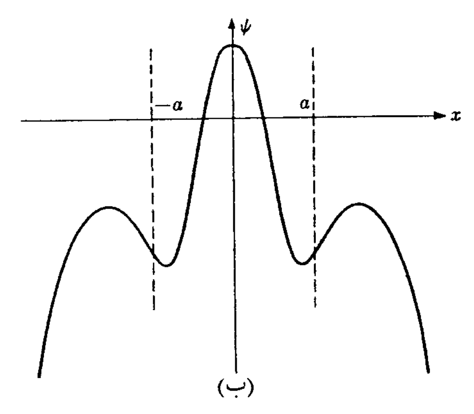
الشكل $3-7$: أ) بئر كمونية . ب) الدالة الموجية لحالةٍ مقيدة في البئر . لاحظ الطبيعة التذبذبية لـ ψ في المنطقة 1 المباحة كلاسيكياً والسلوك الأُسي في المنطقة 2 المحظورة كلاسيكياً . الدالة الموجية المبينة هي الدالة المميزة المحسوبة بخاصةٍ لأجل البئر الكمونية (أ) وقيمة الطاقة E .

uموجباً : بالنسبة لـ u الموجبة تتقوس الدالة نحو الأعلى أو باتجاه الابتعاد عن المحور ، وبالنسبة لـ u السالبة تتقوس الدالة نحو الأسفل ،ومرة أخرى ابتعاداً عن



الشكل $3-8$: بئر كمونية متناظرة





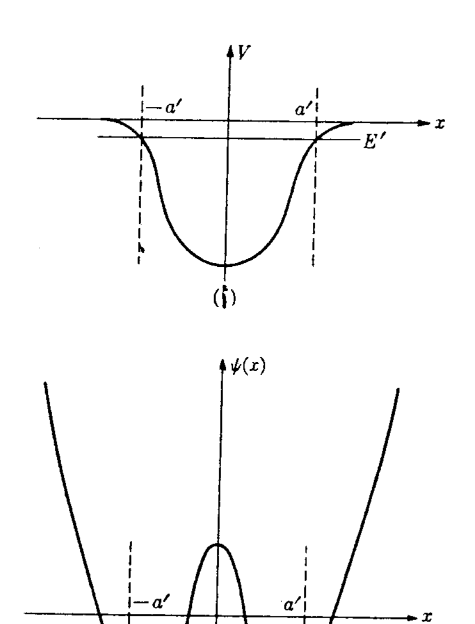
الشكل $3-9$: أ) البئر الكمونية $(3-8)$. ب) حل غير جائز لمعادلة شرودينغر يوافق القيمة E للطاقة ، وهي أقل ، نوعاً ما ، من طاقة الحالة المسموح بها .

المحور . وهكذا ، فإن الحلول تسلك بحيث يكون طابعها حول $u = 0$ تذبذبياً في المناطق المباحة للجسيم كلاسيكياً (أي حيث الطاقة الاجمالية للجسيم أكبر من طاقته الكامنة) وتباعدياً أو أسياً حينما تكون الطاقة الإجمالية أقل من الطاقة الكامنة .

ولكي نرى كيف يؤدي هذا النوع من السلوك إلى قيم مميزة متقطة بالنسبة للطاقات المسموح بها ، سنأخذ الطاقة الكامنة المرسومة في الشكل (3—8) . وبهدف التبسيط ، نفترض أن دالة الطاقة الكامنة متناظرة حول نقطة $x = o$ ، ولنأخذ حلاً للمعادلة التفاضلية في ظل قيمة محددة للطاقة E، وقد أشرنا في الرسم إلى النقطتين $x = a, x = -a$ الموافقتين لوضع تساوي الطاقة E مع الطاقة الكامنة V ، وكما رأينا آنفاً تتمتع الدالة u في المنطقة $x = a$ و$x = -a$ بسلوك تذبذبي ، فتتقوس دائماًباتجاه المحور . فبالنسبة لـ x أكبر من x,a أصغر من $-a$ ، يقع الجسيم في منطقة محظورة كلاسيكياً وتتخذ الدالة الموجية شكلاً يكون تقوسه مباعداً للمحور .

وكما في السابق ، وبسبب التناظر المفترض للدالة $V(x)$ ، يمكن أن توضع في الحسبان فقط الحلول الشفعية أو الوترية ، دون الانتقاص من العمومية . لنأخذ الحل المرسوم على الشكل (3—9) وفي حالة اختيار محدد للمَعْلَم E حيث تم الافتراض أن الحل دالة شفعية بالنسبة لـ x . ومثل هذا الحل له مقطع محدود على محور u ، وينحدر نحو الصفر عند $x = o$ والدالة لها طابع تذبذبي في منطقة $0 < x < a$ ولكنها تبدأ بالتقوس المباعد للمحور عندما تكون $x > a$ ، ويجب أن نلاحظ أن الحل في الحالة (3—9) له شكل متباعد عندما تسعى x إلى اللانهاية ، وهو بالتالي حل غير ملائم لمسألة فيزيائية . ومن جانب آخر . وعندما تكون قيمة الطاقة É الموجبة أكبر نوعاًما ، تمارس الدالة ذبذبتها بطول موجة أقصر في منطقة $0 < x < a'$ والحل له المظهر المبين في الشكل (3—10) . وتتباعد هناايضاً الدالة عندما تصبح x لا نهائية ، لكنها تقطع هذه المرة المحور بعد $x = á$. ولأجل قيمة معينة من قيم المَعْلَم E بين هاتين الحالتين سنحصل على حل تكون الدالة u فيه مقارِبة لمحور x ، كما في الشكل (3—11) . . وواضح من الطبيعة النوعية للحل أن هذه القيمة المحددة من E يقابلها حل « حَسَنُ السلوك » من الناحية الرياضية وله مدلول فيزيائي لهذا فإن E هذه تتمتع بمدلول فيزيائي يكمن في كونها طاقة ممكنة بالنسبة للجسيم .

وكمثال بسيط على هذا الصنف من المسائل ، سنأخذ البئر الكمونية « المربع » ذات الجنبين المرتفعين إلى اللانهاية كما هو مبين في الشكل (3—12) (أ) فهذا يوافق حالة جسيم مقيد بين جدارين غير قابلين للاختراق ضمن منطقة عرضها 2a . وكما أشرنا سابقاً ، فإن الشروط التخومية المناسبة التي يجب فرضها على هذا الطراز من الكمون تنحصر في اختفاء الدالة الموجية عند الجدارين . عندئذ ، يكون شكل الدالة



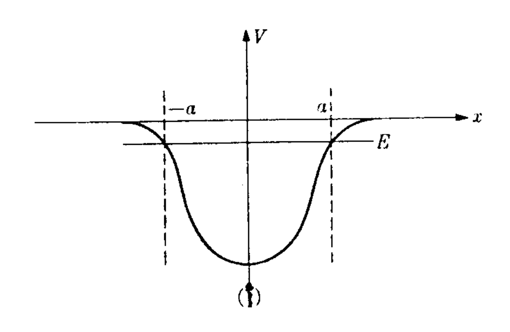
الشكل 3-10 . أ) البئر الكمــونيــة (3-8). ب) حل غير جائز لمعادلة شرودينغر يوافق قيمة $\acute{E}$ للطاقة، وهي أعلى بقليل من القيمة الموافقة للحالة الجائزة.

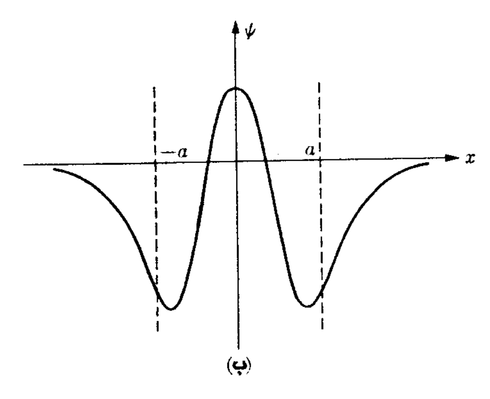
الموجية الملائم هو شكل دالة تذبذبية تختفي عند الجدارين ويفترض هذا الأمر اختيار دالة الجيب أو جَيْب التمام ومرة أخرى بسبب التناظر ، يمكن للدالة أن تكون إما شفعية أو وترية فتعطى الدالة الشفعية كالتالي .

$$u = \cos kx, \qquad -a < x < a, \qquad ka = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \ldots, \tag{3-48}$$

وتعطى الدالة الوترية بالعلاقة :

$$u = \sin kx, \qquad -a < x < a, \qquad ka = \pi, 2\pi, \ldots \tag{3-49}$$





الشكل 3−11 . أ) بئر كموني (3−8) . ب) حل جائز لمعادلة شرودينغر يوافق قيمة الطاقة الجائزة E .

تتحدد القيم الممكنة لـ K ، وكما بينا سابقاً بالشرط التخومي ، فهي ـ انطلاقاًمن المعادلتين (3−49) و(3−48) ـ كالتالي :

$$ka = \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi, \ldots = \frac{n\pi}{2} \qquad (3-50)$$

حيث n أيٍّ عدد صحيح موجب . وباستخدام العلاقة المعطاة بالمعادلة (2−7) بين المَعْلَم K والزخم ، نحصل على صيغة للطاقات الممكنة بالنسبة للجسيم في صندوق وحيد البعد :

$$ka = \frac{pa}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}\, a = \frac{n\pi}{2}, \qquad (3-51)$$

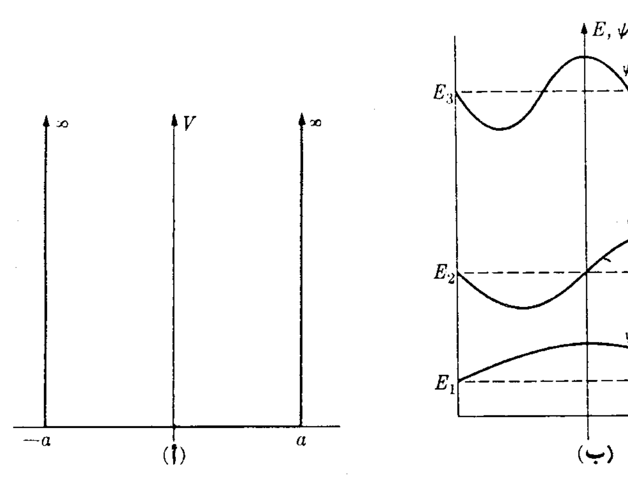
أو

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}\, n^2 \qquad (3-52)$$

ويبين الشكل (3−12) (ب) الدالات الموجية في حالات n=1,2,3 أما الحل العام لمعادلة شرودينغر في هذه المسألة ، فيمكن كتابته على النحو التالي :

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(k_n x - n\,\frac{\pi}{2}\right) \exp\,(-i\omega_n t)$$
$$k_n = \frac{n\pi}{2a}, \qquad \omega_n = \frac{1}{8m\hbar}\left(\frac{\pi\hbar}{a}\, n\right)^2 \qquad (3-53)$$

وبقصد مجاراة الحالة الكلاسيكية ، يمكن اختيار الثوابت Cn ، بحيث تمثل رزيمة موجية ، وبالتالي جسيماً يوجد في النقطة $x = 0$ عند البداية $(t = 0)$ ثم يتحرك إلى اليمين بسرعة محددة . عندئذ تبين المعادلة (3−53) أن الرزيمة الموجية تتذبذب جيئة وذهاباً بين الجدارين بالسرعة المفترضة في البداية ، لكنها وبالتدريج تتباعد لتصبح أعرض زمنياً إلى أن تمسي الحركة غير منتظمة وتفقد طابعها التذبذبي البدائي .



الشكل 3−12 أ) بئر كمونية مستطيلة وحيدة البعد ذات جدارين ارتفاعهما لانهائي . ب) الطاقات الجائزة والدالات الموجية الموافقة للحالات الثلاث الأدنى في هذه البئر . وتمثل الخطوط المتقطعة قيم الطاقة ومحور السينات بالنسبة للدالات الموجية في آن واحد .

هذه الحركة البدائية للرزيمة الموجية هي القرين الميكانيك ـ الكماتي لتوصيف الجسيم كلاسيكياً .

وكمثال آخر على هذا الصنف ـ ذي الأهمية الاستثنائية ـ من المسائل المتعلقة بالحالات المقيدة ، سنأخذ المتذبذب التوافقي البسيط وحيد البعد . ويتمتع هذا النظام الفيزيائي تحديداً في ميكانيك الكم ، بالأهمية العظيمة نفسها التي يتمتع بها في الميكانيك الكلاسيكي . ويعطى مؤثر هاملتون بالعلاقة :

$$\mathrm{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}kx^2 \qquad (3-54)$$

حيث K ترمز الآن إلى ثابت نبض المتذبذب ، وليس إلى متجه انتشار الموجة المستوية كما كان حتى الآن أما معادلة القيم المميزة ، والتي تعطي قيم الطاقات الممكنة بالنسبة للمتذبذب ، فهي :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_n}{dx^2} + \tfrac{1}{2}kx^2u_n = E_nu_n \qquad (3-55)$$

ويمكن تبسيط هذه المعادلة التفاضلية من خلال اختيار قياس جديد للطول وقياس جديد للطاقة ، حيث يكون كل منهما عديم الأبعاد :

$$y \equiv \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4} x \quad \text{و} \qquad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (3-56)$$

حيث :

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \qquad (3-57)$$

وبعد هذه التعويضات ، تؤول المعادلة (55–3) إلى :

$$\frac{d^2u_n}{dy^2} + (\lambda - y^2)u_n = 0 \qquad (3-58)$$

واثناء البحث عن حلول ، جائزة فيزيائياً ومقيدةٍ ، تحقق هذه المعادلة ، سننظر في تبعية السلوك المقارب لهذه الحلول وعندما تسعى y إلى اللانهاية ، فمن الواضح أن λ يمكن تجاهلها بالمقارنة مع y^2 . أما المعادلة التفاضلية الناتجة عن ذلك ، فيمكن حلها بسهولة لنحصل على :

$$u \sim \exp\left(\pm\tfrac{1}{2}y^2\right) \qquad (3-59)$$

ويكون هذا التعبير بالنسبة للسلوك المقارب مناسباً فقط في حال الإشارة السالبة

لقوة الدالة الأسية ومن الواضح ايضاً ، أنه بسبب الاضمحلال السريع جداً لدالة غوس ، وعندما تنتهي y إلى اللانهاية ، سوف يبقى للدالة السلوك المقارب نفسه إذا تم ضربها بأي كثير حدود نهائي تابع لـ y :

$$u = H(y) \exp\left(-\tfrac{1}{2}y^2\right) \tag{3-60}$$

حيث H(y) كثير حدود نهائي تابع لـ y . وطالما يوجد السلوك المقارب الصحيح ، فإنه تبرز أمامنا ضرورة النظر في حل من هذا الشكل بالذات لأجل المعادلة التفاضلية (58−3) . . وبتعويض (60−3) في (58−3) نجد أن :

$$\frac{d^2H(y)}{dy^2} - 2y\frac{dH(y)}{dy} + (\lambda - 1)H(y) = 0 \tag{3-61}$$

لنفترض أن حل هذه المعادلة له شكل كثير حدود نهائي :

$$H(y) = a_0 + a_1y + a_2y^2 + \cdots + a_Ny^N \tag{3-62}$$

وإذا تم تعويض هذا التعبير في المعادلة (61−3)، سنحصل على العلاقة التكرارية ، التي تصل بين المعاملات :

$$a_{s+2} = \frac{2s+1-\lambda}{(s+2)(s+1)}a_s, \qquad s \geq 0 \tag{3-63}$$

وبغية ضمان عملية قص المعاملات من فوق ، بحيث يشكل كثير الحدود (62−3) سلسلة لانهائية ، يجب أن يتحقق الشرط التالي :

$$\lambda = 2n + 1 \tag{3-64}$$

حيث : n عدد صحيح . وبماأن العلاقة التكرارية تصل الدلائل (s) الشفعية بالشفعية والوترية بالوترية ، سوف تضمن المعادلة (64−3) قص الحدود الشفعية (أو الوترية) وحدها . وبالتالي ، فمن الضروري أن يتم طرح افتراض إضافي خلاصته أن الحدود إما أن تكون شفعية كلها أو وترية كلها :

$$a_1 = 0 \tag{3-65}$$

في حالة n الشفعي ، أو

$$a_0 = 0$$

في حالة n الوتري . وهذا متوقع لأن الدالة $V = \frac{1}{2}kx^2$ شفعية .

وإذا عبرنا عن المعادلة (3–64) بلغة الطاقة الأصلية من خلال المعادلة (3–56)، سيكون لدينا:

$$E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \qquad (3-66)$$

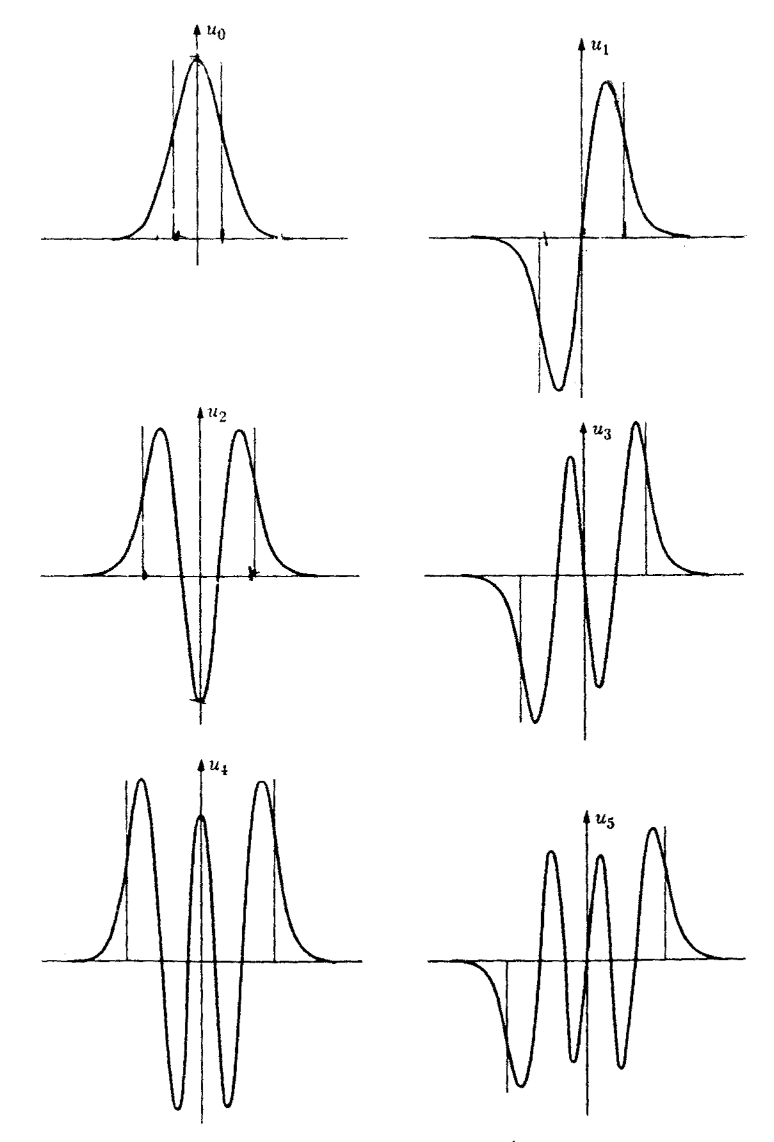
لأجل الطاقات الجائزة بالنسبة لمتذبذب توافقي بسيط . ويجب أن تُقارن هذه النتيجة مع افتراض بلانك الأصلي ، وقد ناقشناه في الفصل الأول .

سنورد فيمايلي الستة الأولى من كثيرات الحدود ، التي تسفر عنها كل من العلاقة التكرارية والمعادلتان (3–64) و (3–65). إن كثيرات الحدود هي مستنظمة ، بطريقة ما ، لاأهمية لها الآن ، وهي تسمى ـ ضمن هذه الصيغة من الاستنظام ـ **كثيرات الحدود الهرميتية** .

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, \\ H_1 &= 2y, \\ H_2 &= 4y^2 - 2, \\ H_3 &= 8y^3 - 12y, \\ H_4 &= 16y^4 - 48y^2 + 12, \\ H_5 &= 32y^5 - 160y^3 + 120y. \end{aligned} \qquad (3-67)$$

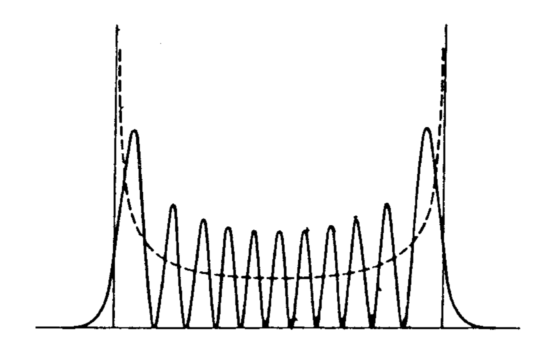
الدالات الموجية الموافقة مبينة في الشكل (3–13)لأجل القيم n نفسها .ويجب أن نلاحظ أن هذه الدالات تتقوس باتجاه المحور في المنطقة الداخلية $|x| < \sqrt{2E/k}$ وباتجاه مباعدللمحور لأجل قيم $|x| > \sqrt{2E/k}$ ، وأنه بالنسبة للقيم الكبيرة من n تبدو الدالات الموجية شديدة الشبه جداً بالأمواج المستقرة ، التي لها عقد وبطون . لذلك ، يجب الافتراض بأن الدالة الموجية سوف تنعكس جيئة وذهاباً بين جداري البئر الكمونية للمتذبذب التوافقي .

كذلك يجب أن نلاحظ أن كثافة الاحتمالية بالنسبة لقيم nالكبيرة . تزداد لتصل قيمتهاالأعظمية في الجوار $|x| = \sqrt{2E/k}$.وهذا يتوافق مع النتيجةالكلاسيكية حول أنالنواس التوافقي البسيط يبدو ، وعلى الأغلب ، ميالاً إلى المكوث عند طرفي ذبذبته ، حيث سرعته تساوي الصفر . في الواقع تعطى كثافة الاحتمالية في الميكانيك الكلاسيكي عبر مقلوب السرعة ، وهذه الدالة مبينة كمنحني متقطع في الشكل (3–14) ، وذلك بالمقارنة مع الدالة $/Un^2$ لأجل $n= 10$.



الشكل 3–13 الدالات الست الأولى الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط. تشير الخطوط العمودية إلى الحدود الكلاسيكية لحركة المتذبذب، الذي يتمتع بقيمة الطاقة نفسها.

إن وجود العقد في توزيع الاحتمالية $|u_n|^2$ ينطوي على مفارقة . فلو كانت



الشكل $(14-3)$: $|U_{10}|^2$ لأجل المتذبذب التوافقي البسيط . دالة توزيع الاحتمالية الكلاسيكية مبينة بوساطة المنحني المتقطع . لاحظ أن المسافة بين العُقَد (نصف طول الموجة) هي أقل ما يمكن في جوار $x=o$ ، حيث يتحرك الجُسَيْم كلاسيكياًبسرعة أكبر .

الأفكار الكلاسيكية صالحة ،لأمكن للجسيم أن يتحرك عبر العقدة فقط إذا كانت سرعته لانهائية ، أو إذا كانت احتمالية العثور عليه هناك لاتساوي الصفر . ومرة أخرى ، تبدو صورة الجسيم كشيء متركز دائماً في الفراغ غير مطابقة .

إن كلتا المسألتين حول الحالات المقيدة (مسألة البئر الكمونية اللانهائية والمتذبذب التوافقي البسيط) . اللتين عالجناهما أعلاه . تتضمن كمونين لانهائيين (على الأقل عندما تسعى x إلى اللانهاية) ولهما طيف لا نهائي من الحالات المقيدة . وليست لا نهائية الكمون شرطاً ضرورياً إطلاقاً لوجود الحالات المقيدة : فالجهد المبين في الشكل (3—6) سيكون له ، على العموم ، حالات مقيدة مرافقة له . أما الان ، وبالرغم من أنه سيكون هنالك عدد نهائي من الطاقات (السالبة) ، التي توافقها حالات مقيدة ، فإن العددُ الدقيق لهذه الحالات يتوقف على عمق البئر الكمونية وعرضها .

3—5 تدفق الجسيمات :

أثناء معالجة مسائل التبعثر ، التي عالجنا مثالاً عليها خلال .لفقرة السابقة ،تظهر فكرة تدفق الجسيم . وبما أننا رأينا أن الدالة الموجية تفسَّر على أنها سعة احتمالية الجسيم ، فمن الواضح أن حركة هذا الأخير سوف ترافقها حركة الدالة الموجية . ويمكن تجسيد هذه الفكرة العامة كمياً بوساطة إدخال كثافة تيار الاحتمالية .

وبماأن مربع سعة الدالة الموجية للجسيم يعطي احتمالية العثور على الأخير في نقطة محددة من الفراغ ، فإن احتمالية العثور على الجسيم في منطقة من الفراغ مرتبطة بالسطح A (انظر الشكل (3−15)) ، وتعطى بالعلاقة :

$$P = \int \bar{\psi}\psi \, dr \qquad (3-68)$$

حيث : dr يمثل عنصر الحجم :

$$dr \equiv dx\, dy\, dz \qquad (3-69)$$

ولكي نصبح قادرين على مناقشة جريان الاحتمالية ، يجب علينا أن نعرف كيف تتغير زمنياًاحتمالية العثور على الجسيم داخل السطح A ، فاشتقاق المعادلة (3−68) بالنسبة للزمن ، يعطينا :

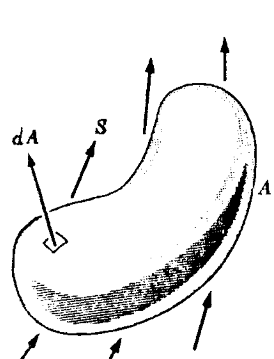
$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt}\int \bar{\psi}\psi \, dr = \int \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}\psi + \bar{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial t}\right) dr \qquad (3-70)$$

وبوساطة كل من معادلة شرودينغر والمعادلة (3−5) ومرافقها العقدي ، يمكننا أن نكتب هذ المعادلة على الشكل التالي :

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int (\bar{\psi}\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\bar{\psi})\, dr \qquad (3-71)$$

يمكن تحويل الطرف الأيمن في هذه المعادلة إلى تكامل سطحي على السطح A ، بوساطة مبرهنة غرين:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_A (\bar{\psi}\nabla\psi - \psi\nabla\bar{\psi}) \cdot dA \qquad (3-72)$$



الشكل $(15-3)$: منطقة من الفراغ محدودة بالسطح A تُبيِّن كلّاً من مُتجه كثافة تدفق الجُسَيْمات S وعنصر المساحة المتناهي في الصغر dA. ويكون اتجاه المتجه dA ناظمياً بالنسبة للسطح A .

ويطرح شكل هذه المعادلة تعريف تيار كثافة الاحتمالية كالآتي :

$$S \equiv -\frac{i\hbar}{2m}(\bar{\psi}\nabla\psi - \nabla\bar{\psi}\,\psi) \qquad (3-73)$$

وإذا عوضنا هذا التعريف في المعادلة (3-72) ستكون النتيجة :

$$\frac{dP}{dt} = -\int_A S \cdot dA \qquad (3-74)$$

وتتمتع هذه الصيغة بتفسير فيزيائي بسيط : مقدار التغير في احتمالية أن يكون الجسيم داخل السطح يساوي القيمة السالبة لتيار كثافة الاحتمالية عبر السطح A .
وإذا استخلصنا تباعد المتجه S، واستخدمنا ، من جديد معادلة شرودينغر ، سنحصل على المعادلة :

$$\nabla \cdot S = -\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\psi}\psi) \qquad (3-75)$$

وهي الصيغة التفاضلية الشهيرة لمعادلة الاستمرارية .

وكمثال ، سنأخذ موجة مستوية في لحظة معينة من الزمن ، أي :

$$\psi = \exp\left(i\,\frac{p \cdot r}{\hbar}\right) \qquad (3-76)$$

إن دالة موجية من هذا الطراز لايمكن استنظامها . ولذا ، فإن المربع المطلق لـ ψ يمكنه أن يمثل فقط الاحتمالية النسبية للعثور على الجسيم في نقطة محددة من الفراغ . ومن الواضح أن كثافة الاحتمالية هذه غير تابعة للموضع ، ويجدر بالمرء أن يعد هذه الموجة تمثيلاً لسرب من الجسيمات يملك كثافة متوسطة تساوي جسيماً واحداً للسنتمتر المكعب . وفي هذه الحالة ، تتحرك الجسيمات بزخم قدره mv ، أو تملك السرعة :

$$v = \frac{p}{m} \qquad (3-77)$$

وبمثل هذه السرعة وبكثافة متوسطة قدرها جسيم واحد في السنتمتر المكعب ، يمر v جسيماً في الثانية عبر سطح مساحته سنتمتر مربع واحد يكون عمودياً بالنسبة لاتجاه حركة الجسيمات ، وهذا مايشكل تدفق احتمالية الموجة . وبمثابةتأكيد لذلك سنحسب تيار كثافة الاحتمالية المعطى بالمعادلة (3-73) لأجل الموجة المستوية (3-76)فتطبيق مؤثر التدرج في المعادلة (3-76) يعطي :

$$\nabla\psi = \frac{ip}{\hbar}\psi \qquad (3-78)$$

وإذا عوضنا هذه الصيغة ومرافقها العقدي في المعادلة (3−73)سنصل إلى :

$$S = \frac{p}{m} \qquad (3-79)$$

وهذا ينسجم مع الحسابات الكلاسيكية لمقدار الجسيمات ، التي ستعبر سنتمتراً مربعاً واحداً من السطح في ظل الشروط المعنية .

وكمثال ثانٍ ، من السهل التأكد بأنه في حالة الدالة الموجية ، التي لها شكل موجتين مستويتين متعاكستين بالاتجاه ،

$$\psi = A_1 \exp\left(i\,\frac{p\cdot r}{\hbar}\right) + A_2 \exp\left(-i\,\frac{p\cdot r}{\hbar}\right) \qquad (3-80)$$

سيعطي تدفق كثافة الاحتمالية S بالمعادلة .

$$S = (|A_1|^2 - |A_2|^2)\,\frac{p}{m} \qquad (3-81)$$

وتتفق هذه النتيجة مع نتيجة المنطلقات الكلاسيكية : يساوي التدفقُ الصافي للجسيمات عبر السطح ، وضمن زوايا قائمة مع المتجه p ، الفارقَ بين تدفقَيْ الموجتين مأخوذين كُلاً على حدة . ومن جهة ثانية ، وفي حالات أكثر عمومية ، مثل حالة موجتين مستويتين غير متعاكستين بالاتجاه ، ستكون هنالك تأثيرات التداخل ، كما رأينا سابقاً ، وتدفق الاحتمالية الصافي ليس مجموعاً بسيطاً للتدفقين المنفردين .

3-6 خلاصـــة :

تفيد الحجج المعتمدة على دالات الأمواج المستوية أن معادلة شرودينغر مقبولة بمثابة معادلة تحدد سلوك الدالة الموجية للجسيم مع مرور الزمن . ولقد جرت مناقشة هذه المعادلة بالاتصال مع تراكب الحالات وتفسيرها الفيزيائي . وتمت مناقشة ثلاثة نماذج من الحركة وحيدة البعد مع أمثلة توضيحية تخص الحركة إلى ماوراء الحاجز الكموني والانعكاس عن حاجز لانهائي والحركة في البئر الكمونية . وقد تضمن ذلك حالة المتذبذب التوافقي البسيط ،وهي حالة هامة عولجت بشيء من التفصيل . وأخيراً ، تم النظر في موضوع تدفق الجسيمات وإدخال مفهوم تيار كثافة الاحتمالية وتطبيق هذا المفهوم على أمثلة تتعلق بالأمواج المستوية .

مسائل

3-1 يكون المستوى البدائي للطاقة الكامنة اعتباطياً في الميكانيك الكلاسيكي ، ماهي التأثيرات ، التي تتعرض لها الدالة الموجية والطاقة بسبب إضافة كمون ثابت Vإلى معادلة شرودينغر .

3-2 جرت في النص معالجة مسألة الاختراق الكموني لحاجز مستطيل بفرض أن $ka \ll k'a \ll 1$. احسب احتمالية الانتقال في الحالة $V < E$ حين يكون الافتراض المذكور غير ساري المفعول .

3-3 احسب معامل الانعكاس لدى معدن الصوديوم بالنسبة للالكترونات متدنية الطاقة بكونه دالة لكل من طاقة الالكترون وزاوية السقوط . بالنسبة للالكترونات التي تكون أطوال موجاتها طويلة بما فيه الكفاية ، يمكن التعامل مع الحاجز الكموني عند سطح المعدن على أنه متقطع . افترض أن الطاقة الكامنة للالكترون في المعدن تساوي (V 5−) . احسب معامل الانكسار لدى المعدن بالنسبة للالكترونات .

3-4 احسبْ تيار كثافة الاحتمالية S لأجل المنطقة: $x > 0$ في حالة العتبة الكمونية الواقعة في $x = 0$، والتي عولجت في النص . ماهو التفسير الفيزيائي لوجود S عندما $E < V$ ؟.

3-5 احسب احتمالية الانتقال للحاجز المبين في الشكل (3−2) بالنسبة لجُسَيْمات كتلتها m وطاقتها $E > V$. افترضْ أن الحاجز رقيق بما فيه الكفاية لأن يتحقق الشرط $\hbar/(2mE)^{1/2} \gg a$ (وهذا يكافىء الافتراض بأن طول موجة دي برولي للجسيم أكبر بكثير من ثخن الحاجز . بينّ هذا التكافؤ) .

3-6 استخلص صيغة واضحة تمثل غلاف الرزيمة الموجية للجسيم .

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-(k - k_0)^2}{a}\right] \exp\left[i(kx - \omega t)\right] dk$$

استحصل السرعة الزمرية لهذه الرزيمة (الغاوسية) وبينّ أنها تتسع عندما تنتقل . .

3-7 عولج في النص الانتقال عبر حاجز كموني رقيق مستطيل الشكل ارتفاعه V وعرضه 2a، حيث $a \ll \hbar/(2mE)^{1/2}$ احسب احتمالية الانتقال عبر حاجزين من هذا النوع تفصل بينهما مسافة قدرها b. ناقش تأثيرات الطنين التي يمكن أن تظهر لأجل قيم معينة من طاقة الجسيمات ومن المسافة b ، التي تفصل بين هذين الحاجزين .

3–8 كرة مثالية المرونة ، تتردد بين جدارين مستويين متوازيين . احسب ، مستخدماً الميكانيك الكلاسيكي ، تغيُّرَ طاقةِ الكرة عندما يقترب الجداران أحدهما من الآخر ببطء وانتظام . بيِّن أن هذا التغير في الطاقة هو نفسه في حالة ميكانيك الكم ، إذا كان العدد الكماتي للكرة (n) لا يتغير . .

3–9 في مقوَّم بلوري مثالي نقطي التماس يعمل في اتجاه « عكسي » ، يفشل التيار الكهربائي في الجريان بسبب الحاجز الكموني الذي يواجه الالكترونات . احسب القيمة التقريبية لاحتمالية الاختراق الكموني الموافق بالنسبة للالكترون الذي يملك طاقة حركية قدرها 2.5 فولطاً ويسقط على حاجز مستطيـــــــل ارتفاعه 3v وعرضه 10^{-7}cm .

الفصل الرابع

تقنيات فورييه والقيم المتوقّعة

4-1تكامل فورييه :

قبل أن نقوم بمناقشة معادلات كل من القيم المميزة والقيم المتوقعة ، سوف ننظر وبإيجاز في بعض التقنيات الرياضية الشكلانية . وسنفترض أن الطالب على معرفة بالكثير من الأمور التالية هنا ، ولذلك سيكون هذا الفصل ، جزئياً على الأقل ، مراجعة . وإذا لم يصح ذلك فسيكون حسناً أن تجري مراجعة نصوص أخرى تساعد على إيضاح المادة بشكل أكثر كمالاً .

لنأخذ ، أولاً ، مسألة نشر سلسلة فورييه . يمكن نشر أية دالة تابعة لـ x (حقيقية كانت أم عقدية) معرّفة ضمن الحدود $-\pi \leq x \leq \pi$ وذات عدد نهائي من نقاط التقاطع في سلسلة فورييه ، كالآتي :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos (nx) + \sum_{n=0}^{\infty} b_n \sin (nx) \qquad (4-1)$$

وبالاستفادة من العلاقة :

$$\exp (ix) \equiv \cos x + i \sin x \qquad (4-2)$$

يمكن التعبير عن المعادلة (1-4) بالصيغة المطابقة التالية :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \exp (inx) \qquad (4-3)$$

لقد تم هنا إدخال الجذر التربيعي لـ 2π بقصد تأمين الراحة في التطوير اللاحق للشرح . فإذا ضربنا طرفي هذه المعادلة بالدالة الأسية exp(−imx) ، وقمنا بالمكاملة من $\pi-$ إلى $\pi+$ ، حيث مجال تعريف الدالة ، سنحصل على الصيغة :

$$A_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \exp (-imx)\, dx \qquad (4-4)$$

والتي تعد بمثابة معادلة تعطي المعاملات في نشر الدالة .

إن تبديل منطقة تعريف الدالة (x) لتقع بين $-\pi a$ و $+\pi a$ يفضي إلى تعميم بسيط للمعادلتين (3-4) و(4-4) :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \exp\left(i \frac{n}{a} x\right) \tag{4-5}$$

$$aA_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi a}^{+\pi a} f(x) \exp\left(-i \frac{n}{a} x\right) dx \tag{4-6}$$

وحين نقوم بإدخال المتغير الجديد K ، الذي نعرّفه على النحو :

$$k \equiv \frac{n}{a} \tag{4-7}$$

ونعرّف دالة جديدة ، تابعة لـ K :

$$F(k) \equiv aA_n \tag{4-8}$$

أما بالنسبة لصنف مناسب من الدلالات f(x) ، فإن النهاية موجودة عندما يسعى a الى اللانهاية . وفي مثل هذه الحالة تستحيل المعادلة (5-4) الى التكامل التالي :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \exp(ikx)\, dk \tag{4-9}$$

حيث :

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-ikx)\, dx \tag{4-10}$$

تعرف الدالة F(k) تحت اسم صيغة فورييه للدالة**f(x)** بينما تعرف الدالة تحت اسم صيغة فورييه للدالة **f(k)**. وتوجد صيغة فورييه ، المعرَّفة بالمعادلة (10-4) فقط عندما يكون مربع الدالة $f(x)$ قابلاً للمكاملة ، أي عندما :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2\, dx < \infty \tag{4-11}$$

يمكن مدُّ كلٍّ من تعريف تكامل فورييه والمعادلتين (9-4) و (10-4)بسهولة الى حالة الفراغ ثلاثي الأبعاد ، اذ من الممكن ، وبالنسبة لدالة تابعة لثلاثة متغيرات : x و y و z ، أن ترتبط بتكامل فورييه على النحو التالي :

$$f(x, y, z) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(k_x, k_y, k_z) \exp\left[i(k_x x + k_y y + k_z z)\right] dk_x\, dk_y\, dk_z \tag{4-12}$$

ويمكن تبسيط هذه الصيغة بشكل كبير إذا عُدَّ التكامل فيها تكاملاً حجمياً على الفراغ k ثلاثي الأبعاد ، حيث الاحداثيات متمثلة بالمتجه k :

$$f(r) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \exp(ik \cdot r)\, dk \tag{4-13}$$

ولاتشير دالةdk هنا - بالطبع - الى تفاضل المتجه ، بل الى عنصر الحجم في الفراغk . وعلى نحو مماثل يمكن كتابة المعادلة المعاكِسة كما يلي :

$$F(k) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} f(r) \exp(-ik \cdot r)\, dr \tag{4-14}$$

4-2 دلتا كرونيكر ودالة دلتا ديراك .

كثيراً ما يلتقي المرء - في ميكانيك الكم - وكما سنرى في الفقرات اللاحقة ، بتعابير رياضية تنطوي على عمليات جمع وفقاً لدليل واحد أو أكثر . وفي الكثير من الأحوال تكون صيغ الجمع هذه قابلة للتبسيط الكبير اذا ما استُخدِم الرمز المعروف ب « دلتا كرونيكر » δ_{nm} . ويملك هذا الرمز دليلَيْن اثنين ويتم تعريفه بالخواص التالية :

$$\begin{aligned} \delta_{nm} &= 1, \qquad n = m, \\ \delta_{nm} &= 0, \qquad n \neq m \end{aligned} \tag{4-15}$$

ستجد دلتا كرونيكر تطبيقاتها الأكثر تكراراً في فقرات لاحقة (الفصل الحادي عشر وما يليه) حيث يتم استخدام التمثيل المصفوفي .

ثمة مفهوم رياضي آخر ، سنجد أنه ذو فائدة كبيرة ، هو دالة دلتا ديراك (*) . ففي حين تبدو هذه الدالة « غير ملائمة » للغاية ، اذا تكلمنا بدقة ، نجد أن من الممكن منحها مدلولاً مرضياً بوساطة وصفات التقييد الملائمة . لنأخذ المعادلة

(*) انظر :

* P. A. M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 3rd ed., 1947, Section 15.

(4–14) والتي يمكن عدُّها بمثابة نشر لدالة كيفية $f(r)$ضمن لغة الدالات الأسية الدورية (أي الأمواج المستوية) التابعة للجداء k.t. ومن المؤسف أنه لايمكن الحصول على صيغة فورييه للدالة الأسية نفسها ، لأن دالة كهذه لاترضي الشرط ، الذي يستلزم أن يكون مربعها قابلاً للمكاملة . وعلى الرغم من أن الموجة المستوية لاتملك صيغة فورييه حقيقية ، كما قلنا ، فبالامكان تعريف دالة دلتا ديراك غير الملائمة بحيث تؤدي دور مثل هذه الصيغة . وللقيام بذلك سنكتب الدالة الأسية الدورية كالآتي :

$$f(x) = \exp(ik_0x) = \lim_{\alpha\to 0} \exp(-\alpha x^2 + ik_0x) \qquad (4-16)$$

يكون تكامل فورييه المحدد بالمعادلة (4–16) موجوداً لأجل أية قيمة نهائية حقيقية وموجبة من قيم . وهذا مايسمح بحساب صيغة فورييه للمعادلة (4–16) :

$$F(k) = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 + ik_0x).\exp(-ikx)\, dx \qquad (4-17)$$

يتلاشى التكامل الناجم هنا عندما $k \neq k_0$ ، ويتباعد حين $k = k_0$ ، وبذلك يعطي الشكل التالي للدالة غير الملائمة F(k) :

$$\begin{aligned} F(k) &= 0, \qquad k \neq k_0, \\ &= \infty, \qquad k = k_0. \end{aligned} \qquad (4-18)$$

تكون هذه الدالة شاذة ، ومع ذلك من الممكن تعريف تكاملها لأجل قيمk كافة ، وذلك باجراء المكاملة قبل ايجاد النهاية :

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\, dk = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha x^2 + i(k_0 - k)x]\, dx \qquad (4-19)$$

ويطرح هذا الوضع ضرورة تعريف دالة شاذة جديدة تسمى **دالة دلتا ديراك** :

$$\delta(k) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx)\, dx \qquad (4-20)$$

ويعني التكامل هنا بالطبع ، التكامل المعرَّف بما يتفق مع وصفة ايجاد النهاية المبينة في المعادلة (4–16) وتتمتع الدالة $\delta(k)$ ، المعرَّفة على هذه الشاكلة ، بالخواص

التالية :

$$\delta(k) = 0, \qquad k \neq 0,$$
$$= \infty, \qquad k = 0, \qquad (4-21)$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(k)\, dk = 1$$

يُفترض خلال أية حسابات تدخل فيها دالة دلتا ، أن هذه الحسابات تتم قبل ايجاد النهاية . وعند التعامل مع دالة نظامية حسنة السلوك ، يجب أن تتم عملية ايجاد النهاية بعد اجراء الحسابات . فدالة دلتا ديراك تكون ذات مدلول فقط تحت رمز التكامل ، حيث يمكن استخدام تقنيات ايجاد النهاية هذه . ونُبيِّن فيما يلي عدة خواص من خواص دالة دلتا :

$$\delta(x) = \delta(-x),$$
$$\int f(x)\, \delta(x-a)\, dx = f(a),$$
$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\,\delta(x), \qquad a > 0, \qquad (4-22)$$
$$\int \delta(x - x_1)\, \delta(x_1 - x_2)\, dx_1 = \delta(x - x_2),$$
$$f(x)\, \delta(x-a) = f(a)\, \delta(x-a)$$

وعلى نحو مشابه لذلك ، الذي استخدم لتعريف دالة دلتا ، من الممكن تعريف دالة دلتا :

$$\delta'(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} ik \exp(ikx)\, dx \qquad (4-23)$$

هذه الدالة التي تم تعريفها بعملية تفاضل شكلية تحت إشارة التكامل في المعادلة (4–20) هي ، بالطبع ، ذات مدلول فقط بمفهوم النهاية ، وهذا ما يفهم من مناقشة المعادلة (4–20) . إن بعض الخواص الشكلية لمشتقة الدالة دلتا هي :

$$-\delta'(x) = \delta'(-x), \qquad \int f(x)\, \delta'(x-a)\, dx = -f'(a) \qquad (4-24)$$

ويمكن سحب تعريف دالة دلتا هذا بسهولة على حالة الأبعاد الثلاثة ليسفر عن دالة دلتا التابعة لمتغيرٍ متجهيٍّ $\boldsymbol{k}$:

$$\delta(k) \equiv \delta(k_x)\,\delta(k_y)\,\delta(k_z)$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)]\,dx\,dy\,dz$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\,d\mathbf{r} \qquad (4-25)$$

وإذا تحدثنا بدقة ، فمن الضروري دائماً أن يضع المرء في ذهنه ذلك المفهوم ، الذي عرِّفتْ وفقاً له هذه الدالات ، كَوْنَ كل منها نهاية لمتتالية من دالات ذات سلوك ملائم . ومع ذلك ، يمكن في الممارسة العملية عادةً أن تُجرى الحسابات مع هذه الدالات وذلك بطريقة مباشرة تماماً وكأنها دالات حسنة السلوك . فمثلاً لندرس استخدام العلاقات ما بين الدالات أعلاه ، وذلك أثناء « اشتقاق » الرابط بين دالة تابعة لـ x وصيغة فورييه الخاصة بها . لنفترض أن دالةx معطاة ، وأن صيغة فورييه لهذه الدالة معرَّفة بوساطة المعادلة (10–4). فاذا تم ضرب هذه المعادلة من طرفيها بالمقدار $1/\sqrt{2\pi}\exp(ikx')$ ومكاملتها على قيم k كافة ، فستكون النتيجة :

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\exp(ikx')\,dk = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\exp[ik(x'-x)]\,dk\,dx \qquad (4-26)$$

وباجراء تبديل لتتالي عمليتي المكاملة مع الاستفادة من تعريف دالة دلتا ، المعطى في المعادلة (20–4) نخلص الى المعادلة التالية :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\exp(ikx')\,dk = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x-x')\,dx \qquad (4-27)$$

والتي نستخلص منها ، مستفيدين من العلاقة الثانية (22–4)، مايلي :

$$f(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\exp(ikx')\,dk \qquad (4-28)$$

كما نستخلص على نحو مماثل العلاقة :

$$\int |f|^2\,dx = \int |F|^2\,dk \qquad (4-29)$$

3-4 معادلات القيَم المميزة

لقد لفتنا الانتباه في الفصل الثالث الى أن معادلة شرودينغر التابعة زمنياً :

$$\mathrm{H}u(r) = Eu(r) \qquad (4-30)$$

تتميز بشكل يُعرَف بمعادلة القيم المميزة . والأجزاء المكونة للمعادلة ، هي : المؤثر ، الذي يرمز له في هذه الحالة بـ H ، والمؤثر في الدالة (الموجبة) U (r) ، وفي الطرف الآخر من المساواة العدد E ، الذي يسمى القيمة المميزة مضروبا بالدالة نفسها . فمعادلة القيم المميزة ، إذاً ، تنص على أن المؤثر ، وبتأثيره في الدالة ، يولِّد الدالة نفسها مضروبة بعامل ثابت . وتسمى الدالة ، التي تحقق المعادلة الدالة المميِّزة للمعادلة الموافقة للقيمة المميزة الخاصة المعنية . ويجب أن نلاحظ أن القيمة المميِّزة في المعادلة (4—30) هي طاقة الجُسَيم .

لقد وجدنا ، أثناء مناقشتنا لمعادلة شرودينغر ، أن مؤثر لابلاس ، وبتأثيره في دالة الموجة المستوية

$$\psi = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p \cdot r - Et)\right] \qquad (4-31)$$

يولد الدالة مضروبة بالعامل $-p^2/\hbar^2$ ، أي :

$$-\hbar^2\nabla^2\psi = -\hbar^2\nabla \cdot \nabla\psi = +p^2\psi \qquad (4-32)$$

وبالتالي فان المؤثر$-\hbar^2\nabla^2$ يملك كلاًّ من قيمة مميزة هي مربع الزخم ودالة مميزة هي الدالة (4—31)، وهذا يطرح ربط المؤثر :

$$\mathrm{P}_x \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad (4-33)$$

بمركبة الزخم في الاتجاه x أو بشكل عام ربط المؤثر :

$$\mathbf{P} \equiv -i\hbar\nabla \equiv -i\hbar\,\mathrm{grad} \qquad (4-34)$$

بمتَّجه الزخم .

وعندها تكون المعادلة المميزة للزخم هي :

$$\mathbf{P}\psi = -i\hbar\nabla\psi = p\psi \qquad (4-35)$$

وحلولها هي :

$$\psi = \exp\left(\frac{ip \cdot r}{\hbar}\right) \qquad (4-36)$$

ويجب ضرب المعادلة (36–4) بثابت أو بدالة زمنية ، وعندها تتحقق المعادلة (35–4) . وهكذا نجد أن الأمواج المستوية ، التي التقيناها سابقاً ، هي دالات مميزة لمؤثر الزخم .

وأثناء مناقشتنا لتطبيق معادلة شرودينغر على المتذبذب التوافقي البسيط ذي البعد الواحد في المعادلة (55–3)، كنا نفترض ضمنياً أن المؤثر المرافق لمربع الموضع x هو x^2 دون غيره . وهذا الأمر موافق لعملية المطابقة بين مؤثر الموضع x والموضع ذاته كعامل x ويقودنا ذلك في الحالة ثلاثية الأبعاد الى :

$$r\psi = r_0\psi \tag{4–37}$$

يمثل r_0 هنا القيمة المميزة وهو متجه ثابت ، بينما يتخذ المؤثر ، والذي هو متغير في الطرف الأيسر ، كل القيم الموافقة لمضمون الدالة ψ . ويكون الحل الوحيد لهذه المعادلة هو الدالة الشاذة :

$$\psi = \delta(r - r_0) \tag{4–38}$$

وتحديداً دالة دلتا ، والتي تساوي الصفر في كل مكان باستثناء $r = r_0$ وهذه الدالة المميزة هي بالذات ما نحتاجه بمثابة دالة موجيّة حيث مربع سعة الدالة يمثل احتمالية العثور على الجُسَيم في نقطة معينة . وإذا كان من المعروف بدقة أن الجُسَيم موجود في النقطة r_0 ، فان الدالة تساوي الصفر في كل الأماكن باستثناء هذه النقطة بالتحديد .

إن الدالتين اللتين تُعطَيان بالمعادلتين (36–4) و (38–4) غير قابلتين للاستنظام . وثمة نقطة أخرى ذات دلالة تتعلق بهاتين الدالتين يجب ملاحظتها وهي أن كلاً منهما يملك شكل صيغة فورييه الخاصة بالأخرى . وكما رأينا ، اذا تم ادخال هذه المؤثرات بطريقة شكلية على مؤثر هاملتون الكلاسيكي الخاص بجُسيم يتحرك ضمن كمون $V(r)$:

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(r) \tag{4–39}$$

نكون قد حصلنا على مؤثر طاقة الجُسيم ، والذي تتحدد من خلال معادلته المميزة (30–4) تبعية الدالة الموجية لموضع الجُسيم في حالة طاقية محددة طاقتها E . وبغية الحصول على التبعية الزمنية ، لابد من استخدام معادلة القيمة المميزة للطاقة الناتجة

عن المعادلتين (7–3) و (8–3)، حيث :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E\psi \qquad (4-40)$$

وهذا يدل على أن مؤثر الطاقة هو :

$$\mathrm{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \qquad (4-41)$$

وتؤول المعادلة (40–4)، والمأخوذة بالتلازم مع المعادلة(30–4) الى معادلة شرودينغر التابعة زمنياً :

$$\mathrm{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \qquad (4-42)$$

وتحدد هذه المعادلة التبعية الزمنية لأية دالة موجيّة (كيفية) تصف حالة نظام فيزيائي ما بغض النظر عما اذا كانت الأخيرة توافق حالة طاقة محددة أم لا .

4–4 القيم المتوقَّعة

لقد رأينا أن المربع المطلق للدالة الموجية يجب أن يُؤخذ بمثابة مقياس لاحتمالية العثور على الجُسَيم في نقطة محددة من الفراغ . وهناك كلمة توضيحية لابد منها لشرح ما تعنيه « الاحتمالية » ضمن هذا السياق . فنحن عندما نتحدث عن الاحتمالية نتصور في الذهن الوضع التالي : لنتخيل تجمعاً من نُظُم متماثلة التكوين ، حيث أن المقصود بقول « متماثلة التكوين » هو كون النُظم متطابقة طالما يجري الحديث عن قياس فيزيائي ، بمعنى أن توصيفها يتم بوساطة دالات موجية متطابقة . والآن ، اذا أجري القياس على واحدة من هذه النُظُم بقصد تحديد ما اذا كان الجسيم يقع في عنصر حجمي معين ، فستكون النتيجة محددة : إما أن الجسيم هناك أو ليس هناك . وعندما يُجرى القياس ذاته على عدد كبير من النظم « متماثلة التكوين »، فان العدد النسبي للمرات التي يتم فيها العثور على الجُسيم ضمن أي حجم معين يؤخذ كمقياس لاحتمالية أن يوجد الجسيم ضمن ذلك العنصر الحجمي .

إن المفترض لاحقاً هو أن الدالة الموجية مستنظمة وقابلة للاستنظام بواحدة ، أي أن :

$$\int |\psi|^2 \, d\tau = 1 \qquad (4-43)$$

وهذا لايمثل أية تقييدات فعلية ، نظراً لأنه من الممكن دائماً وبالنسبة لأي نظام فيزيائي

قابل للتحقيق ، أن نتخيله محصوراً في صندوق كبير جداً ، مما يسمح في كل الأحيان بتعريف دالات موجية قابلة للاستنظام . وقد يكون من المريح أحياناً استخدام دالات موجيّة غير مستنظمة ، ولكن هذا غير جوهري . ففي حالات الدالات الموجية المستنظمة يمثل المربع المطلق للدالة الموجية الاحتمالية الفعلية (ضمن واحدة الحجم) للعثور على الجسيم في نقطة معينة من الفراغ . وهكذا فان القيمة المتوسطة لإحداثي معين من احداثيات الجسيم تعطى بالعلاقة :

$$\langle x \rangle = \int x \cdot (\text{احتمالية وجود الجسيم ضمن العنصر الحجمي dr في النقطة x}) = \int x|\psi|^2\, dr \qquad (4-44)$$

ويشكل كل من جداء المربع المطلق للدالة الموجية والعنصر الحجمي هنا عنصر الاحتمالية الخاص بالعثور على الجسيم في هذه النقطة ، وتعطى مكاملة عنصر الاحتمالية هذا بعد ضربه بالاحداثي x القيمة المتوسطة أو القيمة المتوقعة للاحداثي x . ويجب مرة أخرى أن نلاحظ أن هذا يعني متوسط عدد من القياسات التي تجري للاحداثي x ضمن تجمع من النُظم متماثلة التكوين . وهذه القيمة المتوسطة لـ x أو القيمة المتوقعة لـ x يرمز لها بـ $\langle x \rangle$. وغالباً ما تكتب المعادلة (44–4)، ولأسباب ستتضح لاحقاً على الشكل التالي :

$$\langle x \rangle = \int \bar{\psi} x \psi\, dr \qquad (4-45)$$

سنقوم الآن باستخلاص تعبير مشابه لأجل القيمة المتوسطة لمركبة زخم الجُسيم ، وهذا ما يتحقق عند نشر الدالة الموجية عبر أمواج مستوية . وكما في النقاش بخصوص المعادلة (9–2)سنعد مربع سعة الموجة المستوية المحددة بمثابة مقياس لاحتمالية أن يتميز الجسيم بالزخم الموافق لهذه الموجة . وبداية نكتب الدالة الموجية على شكل تكامل فورييه :

$$\psi = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int \Psi(k) \exp\,(ik \cdot r)\, dk \qquad (4-46)$$

يُفترض أن هذه المعادلة تتحقق لأجل زمن معين ، فالمتغير الزمني مطموس هنا ، لأنه اذا افترضنا الدالة الموجية تابعة للموضع والزمن ، فسيظهر الزمن كمتغير تحت اشارة التكامل ، وستصبح Ψ دالة تابعة لكل من k و T . وبالتالي يفترض أن

قياسات الزخم ، والتي نحن بصددها الآن ، تجري في زمن معين عندما تمتلك الدالة الموجية قيمتها المعينة الواردة في المعادلة (46—4).

يرتبط متجه الانتشار k بالزخم من خلال العلاقة :

$$k = \frac{p}{\hbar} \tag{4-47}$$

وبما أن ψ مستنظمة ، فان نتيجة المعادلة (29—4) هي :

$$\int |\Psi(k)|^2 \, dk = 1 \tag{4-48}$$

وهكذا ، يمكن قراءة $|\Psi(k)|^2$ بمثابة احتمالية أن يكون للجسيم زخم معطى ضمن واحدة الحجم في الفراغ K . وبالتالي فان التعبير المؤاتي بالنسبة للقيمة المتوسطة لمركبة معينة من مركبات زخم الجسيم هو :

$$\langle p_x \rangle = \int |\Psi(k)|^2 p_x \, dk \tag{4-49}$$

ويمكن تحويل هذه النتيجة الى تكامل في الفراغ العادي ، وذلك بالابتداء من معادلة القيمة المميزة للزخم(35—4) ، وباستخدام المعادلة (46—4):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int \Psi(k) p_x \exp(ik \cdot r) \, dk \tag{4-50}$$

أما الضرب بالمترافق العقدي للدالة الموجية ، ومن ثم المكاملة على كامل الفراغ ، فيؤديان الى :

$$\int \bar{\psi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi \, dr = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int \bar{\Psi}(k') \Psi(k) p_x \exp[i(k - k') \cdot r] \, dk' \, dk \, dr \tag{4-51}$$

واذا اقترنت هذه العلاقة بالمعادلة (25—4) فسنحصل على : •

$$\int \bar{\psi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi \, dr = \int \bar{\Psi}(k') \Psi(k) p_x \, \delta(k - k') \, dk' \, dk \tag{4-52}$$

واذا استفدنا من خواص دالة دلتا المعطاة بالمعادلة (22—4) فان المعادلتين (49—4) و (52—4) تعطيان :

$$\langle p_x \rangle = \int |\Psi(k)|^2 p_x \, dk = \int \bar{\psi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi \, dr \tag{4-53}$$

تكون القيمة المتوقعة هنا بالنسبة لمركبة الزخم P_x معطاة بمثابة تكامل في الفراغ . ولنلاحظ التشابه من حيث الشكل بين هذه المعادلة والمعادلة (45—4). وإن الدالة الخاضعة للتكامل في (45—4) هي المترافق العقدي للدالة الموجية مضروباً بالمؤثر X ، الذي يؤثر في الدالة الموجية ذاتها والمكاملة على كامل الفراغ ، وفي هذه الحالة يكون التأثير هو ، ببساطة ، الضرب بالاحداثي X . أما في المعادلة (53—4) فان التكامل له الشكل ذاته باستثناء أن المؤثر هنا يتضمن الاشتقاق بالنسبة لـ X .
ويمكن جعل هذه العلاقة الشكلية أوضح قليلاً اذا استخدمنا الرمز P_x لأجل مؤثر الزخم :

$$P_x \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{4-54}$$

وباستخدام هذا الرمز يصبح التعبير الخاص بالقيمة المتوقعة لمركّبة الزخم P_x كما يلي :

$$\langle p_x \rangle = \int \bar{\psi} P_x \psi \, dr \tag{4-55}$$

وهذه اشارة اضافية الى الأهمية العامة للمؤثرات في شكلانية ميكانيك الكم التي نعرضها . وثمة الكثير من التطبيقات الأكثر أهمية بالنسبة لمفهوم المؤثرات سوف نراها لاحقاً . ان الاجراء ، الذي استخدم أعلاه لأجل حساب هذه القيم المتوسطة ، يقبل التعميم بسهولة ، بحيث يمكّننا من اجراء حسابات القيم المتوسطة لمختلف قوى الاحداثيات والزخم بالنسبة للجسيم . وتكون التعابير الناتجة لأجل هذه القيم المتوقعة هي :

$$\langle p_x^n \rangle = \int \bar{\psi} P_x^n \psi \, dr \tag{4-57}$$

$$\langle x^n \rangle = \int \bar{\psi} x^n \psi \, dr \tag{4-56}$$

هناك نقطة واحدة فيزيائية يجب التأكيد عليها فيما يخص هذه المعادلات . فالدالة الموجية هي ، بالطبع ، حل لمعادلة شرودينغر (42—4)وهي ، لذلك ، دالة لكل من الموضع والزمن كمتغيرين . وبالتالي فان القيم المتوقعة الناتجة عن المعادلتين (45—4) و (55—4) هي دالات زمنية ، وهذا ما يجب تفسيره على النحو الآتي . اذا كان ، في زمن معين ، يجري قياس الموضع أو الزخم ضمن تجمع من الجزئيات التي

يتم توصيفها بدالة موجية مشتركة ، ستعطى القيم المتوسطة لعدة من قياسات عبر هاتين المعادلتين . فطالما تم اجراء القياس ، فيكون التجمع قد اضطرب نتيجة للقياس بشكل ما ، والدالة الموجية لم يعد لها ذلك الشكل نفسه ، الذي كان لها قبل القياس . وسوف يتوقف الشكل الدقيق للدالة الموجية الجديدة ، عموماً ، على نتيجة القياس . ولذا فان القيم المتوسطة المعطاة بالمعادلات (4‒56) و (4‒57) لم تعد تصح إلا إذا قمنا بادخال دالات موجية جديدة لتوصيف التجمعات الناتجة إثر الاضطراب ، الذي سببه القياس . وبالتالي ، من شأن هذه التعابير ، على العموم ، أن تتنبأ فقط بنتيجة القياس الأول ، الذي يُجرى للنظام الفيزيائي . وبعد اجراء هذا القياس ، يجب استخدام دالة موجية جديدة لتوصيف القيم المتوقعة بالنسبة لأية قياسات مقبلة .

لقد رأينا حتى الآن أن القيم المتوقعة للمؤثرات x^n و p_x^n ترتبط بالدالة الموجية عبر صيغ من الشكل التالي :

$$\langle \text{المؤثر} \rangle = \int \bar{\psi} \, (\text{المؤثر}) \, \psi \, d\tau \qquad (4-58)$$

واذا فكرنا بالمقارنة ، يمكن للمرء أن يتوقع صيغة للقيمة المتوسطة لطاقة الجسيم ـ في الحالة ، التي لاتكون طاقته محددة فيها بشكل جيد أو صارم ـ كما يلي :

$$\langle E \rangle = \langle \mathrm{H} \rangle = \int \bar{\psi} \mathrm{H} \psi \, d\tau \qquad (4-59)$$

وهذا ما سنناقشه بتفصيل أكبر في الفصل السادس .

وكمثال نأخذ القيم المتوقعة بالنسبة للمتذبذب التوافقي البسيط ، الذي عولج سابقاً . ولنفترض أن الجسيم يقع في حالة الطاقة الأدنى ، حيث الدالة الموجية معطاة بالعلاقة التالية :

$$\psi_0(x) = \left(\frac{k}{\pi \hbar \omega}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{kx^2}{2\hbar\omega}\right) \qquad (4-60)$$

وتكون هذه المعادلة مطابقة لتلك التي حصلنا عليها سابقاً (3‒60)، باستثناء المعامل الثابت ، الذي يستنظم الدالة الى الواحدة . وباستخدام هذه الدالة الموجية المستنظمة يمكن بسهولة الحصول على القيم المتوقعة التالية في الحالة الدنيا للمتذبذب التوافقي البسيط :

$$\langle x\rangle = \int \bar{\psi}_0 x \psi_0 \, dr = 0,$$

$$\langle x^2\rangle = \int \bar{\psi}_0 x^2 \psi_0 \, dr = \frac{\hbar\omega}{2k},$$

$$\langle p_x\rangle = \int \bar{\psi}_0 \mathrm{P}_x \psi_0 \, dr = 0, \qquad (4-61)$$

$$\langle p_x^2\rangle = \int \bar{\psi}_0 \mathrm{P}_x^2 \psi_0 \, dr = \frac{m\hbar\omega}{2},$$

$$\langle \mathrm{H}\rangle = \left\langle \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{k}{2} x^2 \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}$$

ويجب أن نلاحظ أن القيمة المتوقعة لمؤثر هاملتون في المعادلة الأخيرة من هذه السلسلة يمكن استحصالها من القيم المتوقعة لمربع X ولمربع P_x . ولابد أيضاً من ملاحظة أن الدالة الموجية في المعادلة (4—60) هي دالة مميزة بالنسبة لمؤثر هاملتون ، وبالتالي فان كل قياس يُجرى على طاقة أحد عناصر التجمع ضمن نظام كهذا ، سيعطي هذه القيمة المعينة . وهذا صحيح فقط بالنسبة لقياس الطاقة . أما في حالة المقادير الأخرى ، فسوف نحصل على نتائج مختلفة للقياسات ، وستكون القيم المتوقعة في هذه الحالة القيم المتوسطة بالذات .

4—5 خلاصة

تم في هذا الفصل استعراض موجز لتكامل فورييه وادخال كل من دلتا كرونيكر ودلتا ديراك ، اضافة الى تلخيص خواصها في الحسابات . ومن ثم جرت دراسة معادلات القيم المميزة ، وأعطي وصفٌ موجز لمكانتها في شكلانية ميكانيك الكم . وأخيراً تم النظر في حسابات القيم المتوقعة أو المتوسطة لمعالم النُظم الفيزيائية .

مسائل

4—1 احسب صيغة فورييه لأجل الدالة الموجية ، حيث :

$$\psi = 0, \qquad |x| > a,$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2a}}, \qquad -a \le x \le +a$$

(وعلى الرغم من أنها لاتشكل دالة موجية فيزيائية بدقة ، يمكن عدُّها نهاية بالنسبة لصنف من الدالات المسموح بها فيزيائياً).

4–2 احسب القيم المتوقعة : $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p_x \rangle, \langle p_x^2 \rangle, \quad \langle H \rangle = \langle p_x^2/2m \rangle$
لأجل جسيم في الحفرة الكمونية المربعة ، التي عرضها $2a$ وجداراها لانهائيان في ارتفاعهما (والتي عولجت في الفصل الثالث)، وذلك عندما يكون هذا الجسيم في الحالة الذاتية للطاقة .

4–3 حُلّ معادلة القيمة المميزة ، وحدِّد كلاً من الدالات المميزة والطاقات الجائزة بالنسبة لجسيم محصور ضمن منطقة ذات بعدين محاطة بدائرة $R = a$. وافترض أن الكمون يساوي الصفر داخل هذه الدائرة ، ويصبح لانهائياً عندما تكون $R = a$.

4–4 ثمة متذبذب توافقي بسيط جرى تصميمه ، بحيث يمكن تعديل ثابت النبض الخاص به . ويقع هذا المتذبذب في حالته الطاقية الدنيا عندما يتم فجأة إنقاص ثابت النبض حتى الصفر دون تغيير الدالة الموجية . ما هو السلوك اللاحق للدالة الموجية ؟

4–5 ثمة جسيم حر ذو زخم p يتمثل بموجة مستوية . ويشير جهاز القياس الى أن الجسيم يقع داخل منطقة طولها ℓ . ويُفترض أن المفاعَلَة الحاصلة مع الجسيم تترك الدالة الموجية دون تغيير بالنسبة للمسافة ℓ وتجعلها صفراً خارج هذه المنطقة . ما هو الزخم المتوسط والطاقة الحركية المتوسطة لهذا الجسيم بعد اجراء القياس ؟

4–6 بيِّن أن الزخم المتوسط لأية رُزَيمة موجية ، تمثل جسيماً حراً ، لايتغير مع الزمن .

4–7 بيِّن أن الموضع المتوسط لرزيمة موجية ، تمثل جسيماً حراً يتحرك بسرعة ثابتة ؛ حتى بالرغم من أن الرزيمة الموجية يمكن أن تتشوه على نحو رديء ، بحيث تفقد شكلها الأصلي .

الفصل الخامس

مراجعة للميكانيك الكلاسيكي

5–1 مدخل .

على الرغم من أن ميكانيك الكم يختلف ـ وكما أشير في الفصول السابقة ـ اختلافاً جذرياً عن الميكانيك الكلاسيكي سواءً من حيث التصور الفيزيائي الذي يقدمه أو من حيث الطريقة ، التي تتم بها الصياغة الرياضية لأفكاره ؛ فإن المجالات الكثيرة ، التي أحرزت فيها النظرية الكلاسيكية النجاحات ، تطرح ـ وبمعنى من المعاني ـ ضرورة أن تكون النظرية الكمية امتداداً للنظرية الكلاسيكية أكثر من كونها بديلاً كاملاً لها . وفي الحقيقة جرى تطوير ميكانيك الكم بالمقارنة الوثيقة مع الصياغات الكلاسيكية ، ولاسيما صياغة هاملتون ـ جاكوبي الكلاسيكية للميكانيك . وكما سيتضح في مجرى العرض اللاحق للنظرية الكمية في الفصول التالية ، توجد صلة قرابة وثيقة بين النظريتين الكلاسيكية والكمية . ولهذا السبب سنقدم في هذا الفصل مراجعة موجزة لمختلف الصياغات الكلاسيكية الأكثر عمومية في الميكانيك . ونفترض أن القارىء على معرفة بالمادة التي سنقوم بتغطيتها ، واذا كان الحال خلاف ذلك ، فاننا سنورد استنادات الى المراجع ، التي يُعالج هذا الموضوع فيها بتفصيل أكبر(*) .

5–2 الاحداثيات المعمّمة ومعادلات لاغرانج .

يُعد قانون نيوتن للحركة بخصوص جسيم منفرد أساس الميكانيك الكلاسيكي اللانسبي :

$$F = m\ddot{r} \tag{5–1}$$

* انظر :

* H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass., 1950; H. C. Corben and P. Stehle, *Classical Mechanics*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1950; E. T. Whittaker, *Analytical Dynamics*, Dover Publications, New York, 4th ed., 1944.

ويربط هذا القانون ما بين القوى المؤثرة في الجسيم والتسارع الطارىء عليه .
ويمكن بالنسبة للقوى المحافظة اشتقاق القوة من كمون معين :

$$F = -\nabla V \tag{5-2}$$

حيث : V دالة تابعة للاحداثيات وربما للزمن أيضاً . وان المعادلة (1 – 5) هي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية (وفي الواقع بحكم كونها معادلة متجهية ، فانها تكافىء جملة من ثلاث معادلات ، نحصل عليها بتحليل المتجه على المحاور الثلاثة المتعامدة). و يغطي حلها ، وعبر لغة موضع الجسيم وسرعته الابتدائيين ، توصيفاً لحركة الجسيم في المستقبل كله ، وخلال كل الزمن الماضي . ويكون حل هذه المعادلة المتجهية في الاحداثيات الديكارتية الثلاثية مباشراً ، ولكن في الكثير من الحالات ، يحدث أن توحي خواص التناظر في المسألة أو التقييدات المفروضة الى أنه من المناسب استخدام جملة احداثيات متعامدة أخرى . فمثلاً ، في حالة دوران الجسيم حول مركز ثابت ، وكون القوى المؤثرة فيه موجهة نحو المركز وتابعة فقط للمسافة الفاصلة بين هذا الجسيم والمركز ؛ فمن الواضح أن الاحداثيات الكروية أمر طبيعي في حل المسألة : فالحل سوف يعكس التناظر المميز للوضع ، وهذا ما يمكن التعبير عنه بمزيد من البساطة في الاحداثيات الكروية . لهذا السبب ، ومن المرغوب فيه أن تتم صياغة قوانين الميكانيك بالشكل الذي يمكن تطبيقه بسهولة على أية جملة احداثيات كيفية .

لنأخذ نظاماً يتكون من N جسيماً وهو بالتالي يتمتع بـ $3N$ من درجات الحرية . ويجب أن نختار جملة مناسبة من « الاحداثيات المعممة » q_i ، حيث $(i = 1, 2, 3, \ldots, 3N)$ ، وذلك بهدف توصيف النظام . وسترتبط هذه الاحداثيات بالاحداثيات الديكارتية التي توصِّف الجسيمات ، وذلك من خلال المعادلات التالية :

$$\begin{aligned} x_j &= x_j(q_1, q_2, \ldots, q_{3N}, t), \\ y_j &= y_j(q_1, q_2, \ldots, q_{3N}, t), \\ z_j &= z_j(q_1, q_2, \ldots, q_{3N}, t) \end{aligned} \tag{5-3}$$

أو ببساطة أكبر :

$$r_j = r_j(q_i, t) \tag{5-4}$$

وكما هو مكتوب ، تتضمن معادلات الارتباط الزمن كمتغير بشكل صريح .

أما في حالة استبدال جملة احداثيات ديكارتية محددة بجملة احداثيات أخرى محددة (الاحداثيات الكروية ، مثلاً) فلن تظهر هذه التبعية الصريحة للزمن .

وفي الوقت الذي يمكن فيه تعويض تحويلات الاحداثيات من المعادلات (5-3) في المعادلة(5-1) ـ وفي حالة القوى المحافظة في المعادلة (5-2) ـ تعويضاً مباشراً ، فان المعادلات الناتجة ستكون على العموم معقدة وصعبة الحل . ولهذا السبب يَثْبت أنه من المفيد استخدام تقنيات رياضية أكثر عمومية بمقدورها أن تؤدي ـ في ظل افتراضات ملائمة ـ الى المعادلة (5-1) وكأنها نتيجة « مشتقة » اشتقاقاً . والأكثر من ذلك تسفر هذه المنهجية العمومية والتي تسمى التقنية التغيرية عن نتائج تصلح لحل جُمَل الاحداثيات كافة .

لنأخذ الدالة L بوصفها دالة لا على التعيين تابعة للاحداثيات المعممة q_i والسرعة المعممة $\dot{q}_i$ وللزمن t . ويفترض أن الـدالات $q_i(t)$ تم اختيارها بشكل يجعل للتكامل ، والمعرَّف بالمعادلة التالية :

$$W \equiv \int_{t_1}^{t_2} L\,dt \qquad (5-5)$$

قيمة قصوى أي نهاية أعظمية أو نهاية أصغرية يعـد كل من t_1 و t_2 هنـا تثبيتاً للحـظتين زمنيتين . ويمكن التعبير عن هـذا الشرط المفـروض علـى الدالات $q_i(t)$ بالقـول إن تغيراً صغيراً كيفياً δq_i في الدالة $q_i(t)$ لايغير من قيمة التكامل W . والمفترض بالتغيرات δq_i أن تكون على نحو يجعلها تتلاشى عند اللحظتـين t_1 و t_2 أي في النقطتين الحدوديتين لمسار المكاملة . ويعني ذلك بلغة الحساب التغيري أن :

$$\delta W = \delta \int_{t_1}^{t_2} L\,dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\,\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta \dot{q}_i \right) dt = 0 \qquad (5-6)$$

ومن الواضح أن الدالات $\dot{q}_i$ لاتتبع q_i ، ولذلك فانه :

$$\delta \dot{q}_i = \frac{d}{dt}\,(\delta q_i) \qquad (5-7)$$

ويمكن مكاملة الحد الثاني بين القوسين في (5-6) على طريقة المكاملة بالتجزئة :

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta \dot{q}_i\,dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\frac{d}{dt}\,\delta q_i\,dt = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta q_i \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) \delta q_i\,dt \qquad (5-8)$$

ولأن التغيرات δq_i تنعدم عند t_1 و t_2 فان :

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\, \delta \dot{q}_i\, dt = -\int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) \delta q_i\, dt \qquad (5-9)$$

وبالاستفادة من هذا التعبير يمكن كتابة المعادلة (6—5) على النحو التالي :

$$\sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right] \delta q_i\, dt = 0 \qquad (5-10)$$

وبما أننا افترضنا أن تكون التغيرات δq_i كيفيـــــة ، فان هذه المعادلات تتحقق فقط اذا تلاشى التعبير الوارد بين قوسين أي فيما اذا كان :

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \qquad (5-11)$$

وتعرف هذه المعادلة في حسابات التغيُّر تحت اسم **معادلة أيلر** . وهي تمثل جملة من المعادلات التفاضلية التي تحدد الدالات $q_i(t)$ بطريقة تضمن نهاية أصغرية (أو أعظمية) للتكامل W في المعادلة (5—5) ويجب أن نلاحظ أن المشتقات في المعادلات (11—5) يجب اشتقاقها وكأن كلاًمن q_i و $\dot{q}_i$ متغيرات مستقلة .

وبهدف الحصول على معادلات الحركة بالنسبة للقوى المحافظة :

$$m\ddot{x}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} \qquad (5-12)$$

الخ ،. . .، يحتاج المرء للافتراض بأن :

$$L = T - V = \sum_i \tfrac{1}{2} m(\dot{x}_i)^2 - V(x_i, t) \qquad (5-13)$$

حيث : T — الطاقة الحركية و V — الطاقة الكامنة للجسيم . وفي حال مثل هذا الاختيار للدالة L ، تتحول معادلات أيلر الى **معادلات لاغرانج** وتعرف الدالة L باسم **دالة لاغرانج** .

وبما أن التكامل W يحقق نهاية أصغرية على المسارات $q_i(t)$ الموافقة لحركة الجسيم الفعلية (أي أن معادلات لاغرانج توافق قوانين نيوتن للحركة !)، فسوف يحقق نهايته الأصغرية دون صلة بجملة الاحداثيات التي يتم استخدامها . وهكذا فان معادلات لاغرانج هي المعادلات المنشودة أي معادلات الحركة في جملة احداثيات كيفية .

لنأخذ ، وعلى سبيل المثال ، معادلات الحركة في الاحداثيات الاسطوانية ، وذلك عندما تكون الطاقة الكامنة دالة تابعة فقط لكل من r و z فدالة لاغرانج في هذه الحالة هي :

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2) - V(r, z) \tag{5-14}$$

ومعادلات لاغرانج هي :

$$\begin{aligned} m\ddot{z} + \frac{\partial V}{\partial z} &= 0, \\ m\frac{d}{dt}(r^2\dot{\theta}) &= 0, \\ m\ddot{r} - mr\dot{\theta}^2 + \frac{\partial V}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \tag{5-15}$$

تعبر المعادلة الثانية هنا عن حفظ مركية الزخم على طول المحور Z ، بينما يكون الحد $mr\dot{\theta}^2$ في المعادلة الثالثة مشهوراً على أنه حد « القوة النابذة ».

يمكن تعميم النتائج الواردة أعلاه على حالة النظم غير المحافظة ، اذا كان بالامكان ربط القوى التابعة لمتغير السرعة مع دالة كمونية معممة U ، على الشكل التالي :

$$F_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j} + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j}\right) \tag{5-16}$$

حيث : F_j القوة المعممة في اتجاه الاحداثي المعمم q_i . عندئذ تتخذ دالة لاغرانج الشكل التالي :

$$L = T - U \tag{5-17}$$

وثمة مثال على القوة التابعة للسرعة يتمتع بأهمية قصوى ويحقق هذا التوصيف ، ونقصد به القوة (قوة لورنتز) التي تؤثر في جسيم مشحون في المجال الكهرمغنطيسي . ويمكن في هذه الحالة أن تكتب القوة (بالوحدات الغاوسية) على الشكل التالي :

$$F = q\left[\mathcal{E} + \frac{1}{c}(v \times \mathcal{B})\right] \tag{5-18}$$

سوف يتم التعبير عن المجالات بلغة الكمون السلمي (اللااتجاهي) ϕ

والكمون المتجهي A :

$$\mathcal{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}, \qquad \mathcal{B} = \nabla \times A \tag{5-19}$$

لاتتضمن هاتان المعادلتان وحدانية التوصيف لكل من ϕ و A . أما معادلات ماكسويل والتي يتم التعبير عنها بلغة ϕ و A ، فتتخذ شكلها الأبسط حين يرتبط الكمونان السلمي والمتجهي أحدهما بالآخر عبر شرط لورنتز :

$$\nabla \cdot A + \frac{1}{c}\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \tag{5-20}$$

ومن المعادلتين (18 – 5) و (19 – 5) ينتج :

$$F = q\left\{-\nabla\phi - \frac{1}{c}\left[\frac{\partial A}{\partial t} - v \times (\nabla \times A)\right]\right\} \tag{5-21}$$

وبما أن :

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + (v \cdot \nabla)A \tag{5-22}$$

و :

$$v \times (\nabla \times A) = \nabla(v \cdot A) - (v \cdot \nabla)A \tag{5-23}$$

فان المعادلة (21–5)يمكن أن تكتب على النحو التالي :

$$F = q\left[-\nabla\left(\phi - \frac{1}{c}v \cdot A\right) - \frac{1}{c}\frac{dA}{dt}\right] \tag{5-24}$$

من هنا يمكن رؤية أن اختيار الكمون المعمم U على الشكل :

$$U \equiv q\left(\phi - \frac{1}{c}v \cdot A\right) \tag{5-25}$$

يجعل دالة لاغرانج الموافقة هي :

$$L = T - q\phi + \frac{q}{c}v \cdot A \tag{5-26}$$

بافتراض أن كلاً من ϕ و A لايتوقفان على السرعة .

ان شكلانية لاغرانج ، التي عرضت أعلاه بايجاز ، شكلانية مريحة ، لأن

مسألة الحركة تصاغ بلغة الدالة السلمية المفردة L وليس بلغة جملة المعادلات المتجهية على غرار(1-5). هذا ، اضافة الى أنه يمكن ، وعن طريق الاختيار الملائم للاحداثيات المعممة ، جعل مظاهر تبسيط المسألة أكثر جلاءً . فمثلاً ، لنأخذ الحالة التي تكون دالة لاغرانج فيها مستقلة عن واحد (أو أكثر) من الاحداثيات المعممة ، وسوف تسمى مثل هذه الاحداثيات عندئذ **احداثيات دورية** . وستتخذ معادلة لاغرانج لأجل أحد هذه الاحداثيات الشكل التالي :

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) = 0 \qquad (5-27)$$

والذي يبين أن $\partial L/\partial \dot{q}_k$ أحد ثوابت الحركة . واكتشـــــاف ثوابت الحركة من شأنه التبسيط البالغ لحل مسألة الحركة، وفي الحقيقة فإن الصياغة البديلة للميكانيك ـ والتي ستناقش بعد حين ـ تنشد الاستغلال اللاحق لهذا الواقع .

5-3 معادلات هاملتون .

تشكل معادلات لاغرانج جملة من 3N معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية بالنسبة لـ 3N احداثياً معمماً . أما في صياغة هاملتون للميكانيك فيتم ادخال جملة اضافية من 3N متغيراً مستقلاً . ويؤدي هذا الى 6N معادلة تفاضلية من الدرجة الأولى توصِّف حركة النظام . وبما أن دالة لاغرانج تعطى في الاحداثيات الديكارتية على شكل :

$$L = \sum_{i=1}^{N} \tfrac{1}{2} m_i \dot{r}_i^2 - V(r_1, r_2, \ldots, r_N, t) \qquad (5-28)$$

فإن الزخوم الديكارتية تُعطى بوساطة المعادلات :

$$m_i \dot{x}_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \qquad (5-29)$$

ويعني هذا الأمر أننا نُعرف الزخم المعمم على النحو التالي :

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad (5-30)$$

وفي صياغة هاملتون لعلم التحريك (الديناميك) تُعد هذه الزخوم بمثابة متغيرات مستقلة على قدم المساواة مع الاحداثيـــــات ؛ تُسمى جملة الـ 6N متغير

هذه : (q_i و p_i) المتغيرات القانونية . إن تعريف دالة هاملتون هو :

$$H \equiv \sum (p_i\dot{q}_i) - L \qquad (5-31)$$

وبناءً على المعادلة (5-30) ولأن $L = L(q_i, \dot{q}_i, t)$ ، تبدو الزخوم أيضاً على أنها دالات تابعة لكل من q_i و $\dot{q}_i$ و t . ويمكن حل معادلة تعريف الزخوم' (5-30) عندئذٍ لأجل $\dot{q}_i$ بلغة p_i و q_i ، ويمكن استخدام التعابير الناتجة في المعادلة (5-31) لكي تستخرج q_i. وهكذا يمكن التعبير عن دالة هاملتون بوصفها دالة تابعة للمتغيرات القانونية :

$$H = H(p_i, q_i, t) \qquad (5-32)$$

لذلك نحصل بنتيجة المفاضلة على :

$$dH = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\, dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}\, dp_i\right) + \frac{\partial H}{\partial t}\, dt \qquad (5-33)$$

ومن ناحية ثانية وبناء على (5-31) نجد أن :

$$dH = \sum_i \left(p_i\, d\dot{q}_i + \dot{q}_i\, dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i}\, dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\, d\dot{q}_i\right) - \frac{\partial L}{\partial t}\, dt \qquad (5-34)$$

ويتلاشى الحدان الأول والرابع نظراً للمعادلة (5-30) فيبقى :

$$dH = \sum_i \left(\dot{q}_i\, dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i}\, dq_i\right) - \frac{\partial L}{\partial t}\, dt \qquad (5-35)$$

وتعطي المساواة بين مُعاملاتِ التفاضلات المستقلة dt و dq_i و dp_i في المعادلتين (5-33) و (5-35) **المعادلات القانونية** للحركة :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \qquad (5-36)$$

واذا استخرجنا متغيرات الزخم p_i ، والتي تم ادخالها في شكلانية هاملتون فالنتيجة ستكون ـ وهذا ليس بمفاجأة ـ معادلات لاغرانج . ومن ناحية ثانية تتميز شكلانية هاملتون بنواحٍ أخرى ذات أهمية كبيرة سوف ننظر في بعضها الآن .

بناءً على (5-33) نجد أن :

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\, \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}\, \dot{p}_i\right) + \frac{\partial H}{\partial t} \qquad (5-37)$$

ويحكم المعادلات القانونية (36–5) يمكن الاختصار الى :

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} \qquad (5-38)$$

لذلك اذا لم تكن دالة هاملتون دالة تابعة زمنياً بوضوح فانها ثابت من ثوابت الحركة . وفي حالة الجملة الحركية وجملة الاحداثيات واللتين تجعلان الزمن لايظهر بوضوح في المعادلات التي تعرِّف الاحداثيات المعممة ، تكون الطاقة الحركية T دالة تربيعية متجانسة تابعة لـ $\dot{q}_i$:

$$T = \sum_{i,j} \alpha_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j, \qquad \alpha_{ij} = \alpha_{ji} \qquad (5-39)$$

من هنا نرى أن :

$$\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = 2T \qquad (5-40)$$

ولنفترض لاحقاً أن النظام محافظ $L = (T - V)$ أي أن :

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \qquad (5-41)$$

ويؤدي تعويض آخر علاقتين في (31–5) الى :

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - (T - V) = 2T - (T - V) \\ &= T + V \end{aligned} \qquad (5-42)$$

لذلك ـ يمكن والحالة هذه ـ تفسير دالة هاملتون فيزيائياً على أنها مجموع الطاقتين الحركية والكامنة للنظام لأنه دالة تابعة للمتغيرات القانونية .

تتمتع المتغيرات الدورية في شكلانية هاملتون بالمدلول نفسه الذي تملكه في شكلانية لاغرانج : اذا كانت H مستقلة عن احداثي معمم فان الزخم القانوني الموافق له هو ثابت حركة وينجم هذا الاستنتاج مباشرة عن المعادلة (36–5) .

ثمة حالة خاصة ذات أهمية هي حالة الجسيم الذي يتحرك في مجال كهرمغنطيسي وانطلاقاً من المعادلة (26–5) تكون دالة لاغرانج هي :

$$L = T - q\phi + \frac{q}{c}\, v \cdot A \qquad (5-43)$$

ومن المعادلة (30–5) ينتج أن الزخوم المعممة تعطى بالعلاقة :

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}(v \cdot A) \qquad (5-44)$$

واذا كانت الاحداثيات المعممة غير تابعة للزمن بوضوح أي أن :

$$v \cdot A = \sum_j \dot{q}_j A_j \qquad (5-45)$$

حيث : A_j ليست بالضرورة احدى مركبات المتجه $\vec{A}$ ، فعندئذٍ يكون :

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}(v \cdot A) = \sum_j A_j \delta_{ij} = A_i \qquad (5-46)$$

و :

$$p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{q}{c} A_i \qquad (5-47)$$

حيث :

$$\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = 2T \qquad (5-48)$$

كما في السابق .

تُعطى دالة هاملتون بالعلاقة :

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} + \frac{q}{c} A_i\right)\dot{q}_i - \left[T - q\phi + \frac{q}{c} v \cdot A\right] \\ &= 2T + \frac{q}{c} v \cdot A - T + q\phi - \frac{q}{c} v \cdot A \\ &= T + q\phi \end{aligned} \qquad (5-49)$$

ويتبين أن دالة هاملتون ، في هذه الحالة ، هي مجرد الطاقة الاجمالية للجسيم ، اذ إن $q\phi$ طاقته الكامنة .

تكون الزخزم القانونية في الاحداثيات الديكارتية هي :

$$p_x = mv_x + \frac{q}{c} A_x, \qquad (5-50)$$

الخ . . . . .أو بالصيغة المتجهية :

$$p = mv + \frac{q}{c} A \qquad (5-51)$$

ولابد أن نلاحظ أن الزخم القانوني لم يعد هو مجرد الزخم الخطي العادي mv . من

هنا تكون دالة هاملتون المعطاة بالعلاقة (5−49) هي :

$$H = \frac{[p - (q/c)A]^2}{2m} + q\phi. \qquad (5-52)$$

5−4 أقواس بواسون .

يكون من الملائم أحياناً كثيرة ادخال صيغة رياضية أخرى معروفة باسم قوس بواسون . فاذا كانت G و F دالتين تابعتين للمتغيرات القانونية فان قوس بواسون لـ F و G أي {G , F} يُعرف بأنه :

$$\{F, G\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}\right) \qquad (5-53)$$

ولكي نبين أين يمكن أن تظهر هذه الصيغة لنأخذ دالة كيفية تابعة لكل من الاحداثيات والزخوم القانونية والزمن . ويمكن أن تتخذ مشتقتها الزمنية الشكل التالي :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) \qquad (5-54)$$

وعندما يتم ادخال معادلات هاملتون (5−36) تصبح هذه المشتقة كالتالي :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \qquad (5-55)$$

واضح أن هذه الطريقة في كتابة المعادلات التحريكية لحركة النظام هي طريقة وجيزة جداً . فاذا اخترنا F في (5−55) لتساوي ، على التوالي ، كلاً من q_i و p_i و H ، فان ذلك يقود الى معادلات هاملتون(5−36) و(5−38).ومن سمات أقواس بواسون أيضاً كونها تقدم وسيلة تجريب للكشف عن ثوابت الحركة : فاذا كان :

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\{F, H\} \qquad (5-56)$$

فان F هي ثابت حركة .

وتحديداً اذا كانت F غير تابعة للزمن بوضوح فانها تشكل ثابت حركة عندما يكون قوس بواسون بالنسبة لها ومع دالة هاملتون يساوي الصفر .

وكما سنرى لاحقاً يقدم قوس بواسون أداة قوية لصياغة ميكانيك الكم . ولهذا

السبب سنستعرض خواص متعددة بسيطة ، ولكن هامة ، من خواص أقواس بواسون . فمن تعريف قوس بواسون (53-5) يمكن الحصول فوراً على المطابقات التالية :

$$\{F, F\} = 0, \qquad \{F, c\} = 0 \tag{5-57}$$

حيث : c مستقلة عن q_i و p_i ، ولكن قد تكون تابعاً للزمن . وثم ان :

$$\begin{aligned} \{F, G\} &= -\{G, F\}, \\ \{E+F, G\} &= \{E, G\} + \{F, G\}, \\ \{E, FG\} &= \{E, F\}G + F\{E, G\} \end{aligned} \tag{5-58}$$

كذلك هامة الحالات الخاصة التي تكون F و G مساوية q_i و p_i :

$$\{q_i, q_j\} = 0, \qquad \{p_i, p_j\} = 0, \qquad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \tag{5-59}$$

5-5 التحويلات القانونية .

غالباً ما يشير تناظر الموقف الفيزيائي وأثناء حل المسائل ، الى أن لإحدى جُمَل الاحداثيات المعممة أفضلية على غيرها . فمثلاً في حالة الحركة تحت تأثير قوة مركزية $F(r)$ ، تكون الاحداثيات الكروية خياراً موفقاً أكثر من الاحداثيات الديكارتية . فبالرغم من أن التحويل من جملة احداثيات معممة q_i الى أخرى Q_i هو تحويل مباشر ، يصبح الموقف أكثر تعقيداً ، بدرجة ما ، حين يتعلق الأمر بشكلانية هاملتون حيث الزخوم متساوية مع الاحداثيات بمثابة متغيرات مستقلة . وما هو مطلوب ، عندئذٍ ، هو التحويلات ، التي تكون **قانونية** ، أي التحويلات التي تُبقي على شكل معادلات الحركة (36-5) دون تغيير . ان الاصطلاح الآخر لتسمية تحويل كهذا هو **التحويل الملاصق** .

يتم ادخال 2N متغيراً اضافياً ، وذلك أثناء التأسيس لمتغيرات قانونية جديدة (الاحداثيات Q_i والزخوم P_i) لتحل محل المتغيرات الأصلية q_i و p_i . ومن الواضح أنه بين 4N متغيراً (q_i و p_i و Q_i و P_i) يمكن فقط لـ 2N منها أن تكون مستقلة ؛ اذ يجب أن يكون 2N منها تقبل التعبير عنها من خلال الـ 2N الأخرى . فاذا ما عبرنا عن المتغيرات الجديدة المنشودة Q_i و P_i بلغة المتغيرات القديمة من خلال دالات كيفية :

$$Q_i = Q_i(q_i, p_i, t), \qquad P_i = P_i(q_i, p_i, t) \qquad (5-60)$$

فلن تكون المتغيرات الجديدة ـ بشكل عام ـ قانونية . ومن ناحية أخرى يمكن تبيان أنه اذا بدأ المرء ـ على نحو بديل ـ من دالة كيفية قابلة للاشتقاق $F(q_i, p_i, t)$ ، واستخدمها لتعريف المتغيرين الجديدين Q_j ـ وضمناً ـ p_j وكذلك دالة جديدة K :

$$p_j \equiv \frac{\partial F(q_i, P_i, t)}{\partial q_j},$$

$$Q_j \equiv \frac{\partial F(q_i, P_i, t)}{\partial P_j}, \qquad (5-61)$$

$$K \equiv H + \frac{\partial F(q_i, P_i, t)}{\partial t}$$

اذا بدأ المرء كذلك تستحيل جملة معادلات التحويل (5-60) والتي يتم الحصول عليها من حل للمعادلات (5-61) الى تحويل قانوني من الشكل :

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \qquad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \qquad (5-62)$$

تسمى الدالة $F(q_i, P_i, t)$ **دالة توليد التحويل** . وتلعب الدالة الجديدة $K(q_i, P_i)$ دور دالة هاملتون للنظام الفيزيائي بعد التحويل .

افترض ، أثناء النقاش السابق ، أن دالة التوليد F كانت دالة تابعة للاحداثيات الأصلية q_i والزخوم الجديدة P_i ، ومن الممكن أيضاً استخدام دالات التوليد ذات الشكل $F_1(q_i, Q_i, t)$ أو $F_2(q_i, p_i, t)$ أو $F_3(p_i, Q_i, t)$. وفي حالة واحدة من هذه الدالات ستكون العلاقات التي تحدد التحويل (5-61) مختلفة ، ولكن من الممكن حلها وعلى نحو مماثل للوصول الى معادلات التحويل من الطراز (5-60) . وسوف نرى المثيل الميكانيكي ـ الكماتي لهذه المسألة لاحقاً .

ثمة مثال بسيط تقدمه دالة التوليد :

$$F = \sum q_i P_i \qquad (5-63)$$

وفي هذه الحالة تؤدي المعادلات (5-61) الى :

$$p_i = P_i, \qquad Q_i = q_i, \qquad K = H \qquad (5-64)$$

إن هذا التحويل الذي يُبقي على الاحداثيات والزخوم دون تغيير هو التحويل المطابق البسيط .

ان مفهوم التحويل القانوني لانهائي الصغر هو مفهوم مفيد ، اذ إن تحويلاً كهذا - كما يستدل من تسميته - يُحدث تغييرات لانهائية الصغر في المتغيرات ولهذا فان دالة التوليد تختلف عن التحويل المطابق الذي نوقش سابقاً فقط بكمية لانهائية الصغر :

$$F = \sum_i q_i P_i + \epsilon G(q_i, P_i) \qquad (5-65)$$

إن G هنا هي كمية ثابتة لانهائية الصغر . وبينما تمثل F دالة التوليد الفعلية ، يتم النظر إلى G ، وفي بعض الأحيان ، بصفتها دالة توليد أيضاً ؛ والمصطلح الذي سيستخدم في هذا الكتاب ينطبق على Fأو G كلتيهما . ومن المعادلات (5-61) نجد أن :

$$p_j = P_j + \epsilon \frac{\partial G(q_i, P_i)}{\partial q_j} \qquad (5-66)$$

أو :

$$\delta p_j \equiv P_j - p_j = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \qquad (5-67)$$

وعلى نحو مماثل ينتج من المعادلات (5-61) أن :

$$Q_j = q_j + \epsilon \frac{\partial G(q_i, P_i)}{\partial P_j} \qquad (5-68)$$

أو :

$$\delta q_j \equiv Q_j - q_j = \epsilon \frac{\partial G}{\partial P_j} \qquad (5-69)$$

إن الحدود التي تتضمن القوة الأولى لـ ϵ ، هي وحدها ، التي سنهتم بها . وبما أن الأمر كذلك ، يمكننا الآن أن نستبدل بـ p_j في المعادلة (5-69) P_j لنحصل على :

$$\delta q_j = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_j} \qquad (5-70)$$

حيث تعد G الآن دالة لكل من q_i و P_i .

ان تأثير تحويل قانوني كهذا لانهائي الصغر يكمن في احداث تغير δW في أية دالة W(qi,pi) ، بحيث ان :

$$\delta W = \sum_i \left(\frac{\partial W}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial W}{\partial p_i} \delta p_i \right) \qquad (5-71)$$

وبالاستفادة من المعادلتين (5-67) و (5-70) ، تتحول هذه النتيجة الى :

$$\delta W = \epsilon \{W, G\} \qquad (5-72)$$

وهكذا ، فان التغيرات الطارئة على أية دالة تعطى من خلال قوس بواسون لهذه الدالة مع دالة التوليد G .

5-6 خلاصة .

ناقشنا في هذه المراجعة الموجزة لشكلانيات كلاسيكية محددة الحاجة الى جملة احداثيات أكثر عمومية من الجملة الديكارتية وبيّنا كيف أن قانون نيوتن الثاني للحركة يمكن اعادة صياغته بلغة احداثيات معممة من شأنها أن تسفر عن معادلات لاغرانج وقد أنجزنا ذلك مستخدمين الحسابات التغيرية .

وقد أشرنا الى مدلول الاحداثيات الدورية في هذه الشكلانية ثم استعرضنا صياغة هاملتون لمعادلات الحركة مع ادخال الزخوم القانونية المعممة بمثابة متغيرات مستقلة كما تم المرور بايجاز علىبعض الخواص الهامة لوجهة نظر الشكلانية الهاملتونية وتم تعريف أقواس بواسون وايراد عدد من خواصها .

أخيراً ، نوقشت التحويلات القانونية التي تحافظ على الشكل الهاملتوني لمعادلات الحركة أثناء تبديل اختيارنا للمتغيرات المستقلة وأُدخل مفهوم التحويل القانوني لانهائي الصغر .

الفصل السادس

شكلانية المؤثرات

6−1 فرضيات ميكانيك الكم .

رأينا في الفصل الثالث أن المؤثرات تلعب دوراً هاماً في ميكانيك الكم . فالموجة المستوية مثلاً ، والتي تمثل حالة جسيم حر ذي زخم محدد تستجيب لمعادلة القيمة المميزة :

$$\mathbf{P} \exp [i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] = \boldsymbol{p} \exp [i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] \qquad (6-1)$$

حيث مؤثر الزخم $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla$ يؤثر في الدالة المميزة ـ وهي في هذه الحالة موجة مستوية ـ ويؤدي الى القيمة المميزة $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ مضروبة بالدالة المميزة . ولقد تم استخلاص عدة من استنتاجات هامة من مناقشة معادلة القيمة المميزة هذه :

1) الملحوظ $\vec{p}$ ، ككمية قابلة للقياس أرفق بمؤثر $\vec{\mathbf{P}}$.

2) معادلة القيمة المميزة لهذا المؤثر تملك بمثابة دالاتها المميزة تلك الدالات الموجيّة ، التي تمثل حالات الزخم عندما يتميز ببعض القيم المحددة .

3) القيمة المميزة هي تلك القيمة التي سيتم الحصول عليها لو أُجري قياس الزخم .

4) اذا كانت الدالة الموجية ليست احدى الدالات المميزة بل تتمثل ـ عوضاً عن ذلك ـ عبر تراكب الأمواج المستوية فليس ممكناً التنبؤ : أي سوف يتم الحصول على واحد من الزخوم المختلفة (المرفقة بالأمواج المستوية المكوِّنة للتراكب) فيما لو أجري قياس للزخم . ومن ناحية ثانية وجدنا أن مربع السعة المرتبطة بأية موجة مستوية مكونة للتراكب يعطي مقياس احتمالية الحصول على القيمة الموافقة لقياس الزخم . ولقد قادنا هذا الأمر الى المعادلة (55−4) كتعبير عن الزخم المتوسط للجسيم . ولقد تبيَّنا بدقة أنه لو تخيلنا وجود تجمع من النُظم التي تملك جميعها الدالة الموجية نفسها ، فان قياس الزخم لدى جميع أعضاء

التجمع من شأنه أن يسفر عن نتائج مغايرة للمعادلة (55−4) بوصفها قيمة متوسطة .

5) اذا كان زخم الجسيم ضمن حالة تراكب الزخوم هذه سوف يقاس ، فان الدالة الموجية للجسيم يجب أن تكون موجة مستوية بالذات .

ولقد وجدنا أن طاقة الجسيم ترفق بمؤثر هاملتون وموضعه يرفق بالمؤثرrوسوف تؤسس هذه الأفكار الآن على قاعدة من الفرضيات الشكلانية كما سيتم اشتقاق بعض من خواص المؤثرات وخواص معادلات قيمها المميزة . ويمكن رؤية المعقولية الفيزائية لهذه الفرضيات من النقاشات التي جرت في الفصول السابقة .

الفرضية *1* : لأجل نظام يتكون من جسيم يتحرك في مجال قوة محافظة (ناجمة عن كمون خارجي) يُفترض أن تكون هناك دالة موجية مرافقة ، وأن هذه الدالة الموجية تحدد كل مايمكن أن يُعرف عن هذا النظام ، وأنها دالة وحيدة القيمة بالنسبة لاحداثيات كل من الجُسَيم والزمن(*) . وعلى العموم ، فإنها دالة عقدية ، ويمكن أن تُضرب بأي عدد مركب دون أن يتغير مدلولها الفيزيائي .

الفرضية *2* : كل ملحوظ فيزيائي (مثل طاقة النظام الاحداثي x لموضع الجسيم . . الخ) مُرفق بمؤثِّر . لنرمز بـQإلى المؤثر المرفق بالملحوظ q عندئذ يُسفر قياسqعن نتيجة هي احدى القيم المميزة لمعادلة القيم المميزة :

$$Q\psi_n = q_n\psi_n \qquad (6-2)$$

(*)بما أن $|\psi|^2$ ، كما تبيَّن ـ وليس ψ ذاتها ـ يشكل كمية ذات مدلول فيزيائي قابل للقياس ، فإن ضرورة الافتراض حول وحدانية القيمة ليست واضحة ؛ بشكل مسبق . ولكن صعوبات رياضية مختلفة تنشأ ، إذا تم التخلي عن افتراض وحدانية القيمة ، ولذلك فسيتم الإبقاء عليه لأجل أغراض هذا الكتاب . بقصد الإطلاع على مناقشة أكثر تفصيلاً لهذه النقطة ، انظر :

W. Pauli, *Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*, J. W. Edwards, Ann Arbor, Mich., 1947, p. 126 (reprinted from *Handbuch der Physik*, 2nd ed., vol. 24, part 1);

J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1952, Appendix A, footnotes on p. 783 and p. 787.

يشكل هذا القياس مفاعلة بين النظام وجهاز القياس . وإذا كانت الدالة الموجية ψ_n قبل القياس فمن المؤكد أن النتيجة q_n يتمخض عنها القياس الدقيقي للملحوظ الذي أرفق به المؤثر . وإذا كانت الدالة الموجية في البداية ليست حلاً مميزاً للمعادلة (6—2) فمن المستحيل التبنؤ الأكيد : أية واحدة من النتائج الكثيرة الممكنة هي التي سيتم الحصول عليها . ومن ناحية ثانية إذا تم الحصول على النتيجة q_n فالمفاعلة تغير حالة النظام إلى الحالة ، التي توصّفها الدالة ψ_n وهذا يكافىء الشرط القاضي بأن يكون القياس قابلاً للتكرار : أي أن القياس الذي يسفر عن النتيجة q_n . سوف يعطي ، إذا ماتكرر حالاً ، النتيجة نفسها بالتأكيد .

تعريف 1 . المؤثر Q مؤثر هرميتيٌ اذا كان :

$$\int \overline{\psi_a} Q \psi_b \, d\tau = \int \overline{Q\psi_a} \psi_b \, d\tau \qquad (6-3)$$

حيث : ψ_a و ψ_b دالتان كيفيتان مستنظمتان ، ويفترض بالمكاملة أن تتم على الفراغ ثلاثي الأبعاد بأكمله . من الواضح أن المؤثر x المرفق بقياس الاحداثي x لموضع الجسيم هو مؤثر هرميتي . ويمكن أيضاً ملاحظة الصفة الهرميتية للمؤثر $P_x = -i\hbar(\partial/\partial x$ المرفق بمركبة الزخم في الاتجاه x . وينتج هذا الأمر عن عملية المكاملة بالتجزئة مع فرض الشرط القاضي بأن تتلاشى الدالة الموجية في اللانهاية .

بما أن P_x مؤثر هرميتي ، فمربعه P_x^2 كذلك مؤثر هرميتي ، وكذلك أية قوة لـ P_x هي مؤثر هرميتي ، كما يتبين هنا :

$$\int \overline{\psi_a} P_x^2 \psi_b \, d\tau = \int \overline{P_x\psi_a} \cdot P_x\psi_b \, d\tau = \int \overline{P_x^2\psi_a} \psi_b \, d\tau \qquad (6-4)$$

اضافة الى أن التركيب الخطي لمؤثرات هرميتية يشكل مؤثراً هرميتياً .

سوف نتعرض الآن بالنقاش لعدد من النتائج الأولية ، التي تنجم مباشرة عن الفرضيتين اللتين وضعتا أعلاه ، والتي يمكن صياغتها على شكل مبرهنات . وتُعد هذه المبرهَنات ورغم بساطة البرهان عليها أساسية في البنية العامة لشكلانية ميكانيك الكم . وسنناقش أولاً مبرهَنتين تربطان المؤثرات الهرميتية بخواص دالاتها المميزة والموافقة لها .

مبرهنة 1 . كل القيم المميزة للمؤثر الهرميتي حقيقية .
البرهان :

$$Q\psi_n = q_n\psi_n,$$
$$\int \overline{\psi_n} Q\psi_n \, dr = \int \overline{\psi_n} q_n \psi_n \, dr = q_n \int \overline{\psi_n}\psi_n \, dr, \qquad (6-5)$$
$$\int \overline{Q\psi_n}\psi_n \, dr = \int \overline{q_n\psi_n}\psi_n \, dr = \overline{q_n}\int \overline{\psi_n}\psi_n \, dr$$

ولذلك فان :

$$\overline{q_n} = q_n \qquad (6-6)$$

و q_n حقيقية . وهذه نتيجة هامة في الشكلانية،وذلك من حيث أن القيم المميزة تُفسَّر على أنها نتائج القياسات وهذه النتائج هي أعداد حقيقية .

وقبل متابعة استعراضنا للمبرهَنات هناك حاجة لفرضية وعدة من تعريفات .

الفرضية 3 . كل مؤثِّر مُرفق بكمية فيزيائية قابلة للقياس هو مؤثر هرميتي .

تعريف 2 . يقال عن دالتين موجيتين انهما متعامدتان عندما :

$$\int \overline{\psi_a}\psi_b \, dr = 0 \qquad (6-7)$$

تعريف 3 . تكون جملة من الدالات مستقلة خطياً اذا كانت المعادلة الخطية :

$$\sum_j c_j\psi_j = 0 \qquad (6-8)$$

تضمن أن جميع c_j تساوي الصفر . واذا لم تكن الدالات مستقلة خطياً يقال عنها إنها تابعة خطياً .

تعريف 4 . القيمة المميزة q لمعادلة القيم المميزة هي قيمةمفككة من المرتبة m اذا كان هنالكm دالة مميزة مستقلة خطياً موافقة لها .

لنأخذ الآن مبرهَنة أخرى تنجم مباشرة عن الصفة الهرميتية للمؤثر ، وهي تتعلق بالدالات المميزة للمؤثر الهرميتي .

مبرهَنة 2 . **التعامد** . كل اثنتين من الدالات المميزة للمؤثر الهرميتي تعامد احداهما الأخرى اذا كانت القيمتان الذاتيتان الموافقتان لهما غير متساويتين .

البرهان :

$$\int \overline{\psi_n} Q\psi_m\, dr = \int \overline{Q\psi_n}\psi_m\, dr = \overline{q_n}\int \overline{\psi_n}\psi_m\, dr$$
$$= q_n\int \overline{\psi_n}\psi_m\, dr$$
$$= \int \overline{\psi_n} Q\psi_m\, dr = q_m\int \overline{\psi_n}\psi_m\, dr \qquad (6-9)$$

$$(q_n - q_m)\int \overline{\psi_n}\psi_m\, dr = 0 \qquad (6-10)$$

ولذلك فان :

$$\int \overline{\psi_n}\psi_m\, dr = 0 \qquad (q_n \neq q_m \qquad (6-11)$$

مبرهنة 3 . اذا كانت القيمة المميزة q للمؤثر Q مفكّكة فإن أي تركيب خطي من دالاته المميزة المستقلة خطياً هو أيضاً دالة مميزة :

$$Q\left(\sum_n c_n\psi_n\right) = q\left(\sum_n c_n\psi_n\right) \qquad (6-12)$$

وينتج ذلك ، وعلى نحو واضح ، من الصفة الخطية للمعادلة .

تعريف 5 . تشكل جملةٌ من الدالات جملةً تامة للدالات المميزة المستقلة خطياً الموافقة للقيمة المميزة q اذا كانت هذه الجملة تابعة خطياً مع أية دالة مميزة أخرى موافقة لـ q . وبكلمات أخرى ، تكون جملة الدالات تامة اذا لم يكن هنالك أية دالة سواها تدخل ضمن جملة الدالات المستقلة خطياً .

مبرهَنة 4 . اذا كانت الدالات $\psi_j\ (j = 1, \ldots, m)$ تشكل جملة تامة من الدالات المميزة للقيمة q ،ذات المرتبة m من التفكك ، والمميزة بالنسبة لمؤثر ما ؛ فإن أية دالة مميزة أخرى موافقة لهذه القيمة المميزة يمكن نشرها بلغة تلك الجملة التامة .

البرهان : ليكن :

$$a\psi - \sum_{j=1}^{m} c_j\psi_j = 0 \qquad (6-13)$$

واذا كان a يساوي الصفر فان كل c في هذه المعادلة يجب ، عندئذٍ ، أن يساوي الصفر ، ذلك لأن هذه الدالات مستقلة خطياً . ولو كان هذا هو الامكان الوحيد

لحل المعادلة لكان من شأن ψ أن تكون عنصراً في جملة الدالات المستقلة خطياً . ولكن بما أننا افترضنا كون جملة الدالات من ψ_1 إلى ψ_m مستقلة خطياً وتامة فانه لابد أن يوجد حل للمعادلة (6–13) عندما a لاتساوي الصفر . واذا كانت a لاتساوي الصفر فان :

$$\psi = \frac{1}{a} \sum_j c_j \psi_j \qquad (6-14)$$

وتلك صيغة النشر المنشود .

مبرهنة 5 . يجب أن تؤخذ التركيبات الخطية لـ ψ_j لتشكل جملة من m دالة متعامدة فيما بينها . وستكون هذه الدالات ذات التعامد المتبادل وعددها بالطبع مستقلة خطياً أيضاً ويمكن استخدامها لأجل نشر أية دالة مميزة أخرى موافقة للقيمة المميزة المعنية،ويمكن التأكد من هذه المبرهنة بوساطة إجراء شميدت للتعامد والذي نستعرضه أدناه .

إجراء شميدت للتعامد . لنرمز الى جملة من الدالات المستقلة الموافقة للقيمة المميزة بالرمز ψ_j حيث $(j = 1, \ldots, m)$ ، ولنخْتَرْ أية واحدة من هذه الدالات ولتكن ψ_1 بمثابة العنصر الأول في جملة جديدة من الدالات $u_j \ (j = 1, \ldots, m)$:

$$u_1 \equiv \psi_1 \qquad (6-15)$$

لندخل الرمزين :

$$\int |u_1|^2 \, dr \equiv c_{11}, \qquad \int \overline{u_1} \psi_2 \, dr \equiv c_{12} \qquad (6-16)$$

ولنأخذ :

$$u_2 \equiv \frac{c_{12}}{c_{11}} u_1 - \psi_2 \qquad (6-17)$$

من الواضح أنَّ :

$$\int \overline{u_1} u_2 \, dr = 0 \qquad (6-18)$$

لندخل الرموز :

$$\int |u_2|^2 \, dr \equiv c_{22}, \qquad \int \overline{u_1} \psi_3 \, dr \equiv c_{13}, \qquad \int \overline{u_2} \psi_3 \, dr \equiv c_{23} \qquad (6-19)$$

ثم لنأخذ :

$$u_3 \equiv \frac{c_{13}}{c_{11}} u_1 + \frac{c_{23}}{c_{22}} u_2 - \psi_3 \qquad (6-20)$$

من الواضح ، عندئذ ، أن :

$$\int \overline{u_1} u_3 \, dr = \int \overline{u_2} u_3 \, dr = 0 \qquad (6-21)$$

ويمكن لهذا الاجراء أن يمتد لكي يشمل $u_4, u_5, \ldots, u_m$. وبما أن الدالات المميزة الموافقة لقيم مختلفة تكون متعامدة ، بطبيعة الحال ، نظراً للمعادلة (6-11) ، فان الاجراء المعروض أعلاه يمكن ان يستخدم للحصول على جملة متعامدة من الدالات المميزة لأجل أي مؤثر هرميتي .

الفرضية 4 . إن جملة الدالات ψ_j والتي هي دالات مميزة لمعادلة القيمة المميزة :

$$Q\psi_j = q_j\psi_j \qquad (6-22)$$

تشكل ، على العموم ، جملة لانهائية من الدالات المستقلة خطياً . والتركيب الخطي لهذه الدالات ذو الشكل :

$$\psi = \sum_j c_j\psi_j \qquad (6-23)$$

يمكن أن يستخدم للتعبير عن عدد لانهائي من الدالات الممكنة . ويجدر بالمرء أن يتوقع امكان استخدام هذه الجملة اللانهائية من الدالات المستقلة خطياً بقصد نشر أية دالة كيفية ψ . وفي الواقع يكون هذا الافتراض الزامياً أكثر منه ضروري . وسوف نفترض فقط أن هذه الجملة اللانهائية من الدالات المتكونة من الدالات المميزة لأي مؤثر ذي دور في ميكانيك الكم يمكن استخدامها لنشر الدالة الموجية التي تكون مناسبة فيزيائياً . أما الأسئلة المتعلقة بامكان نشر دالة معينة ذات سلوك سيء جزئياً فلن يتم النظر فيها . ويُفترض خصوصاً أنه اذا كانت ψ دالة موجية مقبولة فيزيائياً يمكن نشرها عبر الدالات المميزة لأي ملحوظ من بين معالم النظام .

وبفرض أن الجملة التامة المستقلة خطياً والمتكونة من الدالات المُميزة لمؤثر ما ، قد تم اختيارها بحيث تكون متعامدة ، وبفرض لاحق حول أن كلاً من هذه الدالات

المميزة ذو مربع قابل للمكاملة ، وأنها كلها تقبل الاستنظام على أساس الواحدة ، نجد أن :

$$\int \overline{\psi}_j \psi_k \, d\tau = \delta_{jk} \qquad (6-24)$$

وتسمى مثل هذه الجملة من الدالات **جملة تامة متعامدة ومستنظمة** . ويمكن تقدير معامِلات النشر c_j في المعادلة (6−23) ، بسهولة لأجل جملة كهذه من خلال المعادلة (6−24) :

$$c_j = \int \overline{\psi}_j \psi \, d\tau \qquad (6-25)$$

تعريف 6 . اذا وجدت جملة تامة (بمعنى الفرضية 4) من دالات الحالة ψ_j المستقلة خطياً ، بحيث تكون ψ_j دالة مميزة للمؤثرين R و S الموافقين للملحوظين فيزيائيين ، يسميان ملحوظين متلائمين . والمقصود بـ « الملحوظين المتلائمين » هو أنه يمكن التنبؤ بكل من R و S بشكل كامل لأجل الجملة التامة من دالات الحالة ψ_j . وواضح أن كلاًّ من الموضع والزخم كقياسين للملحوظين ليسا متلائمين ومن جهة أخرى نجد أن المركبات الثلاث للموضع أو المركبات الثلاث للزخم قابلة للقياس في آن واحد ، وهي بالتالي متلائمة .

تعريف 7 . إذا كان

$$Q\psi = R\psi \qquad (6-26)$$

لأجل أية دالة ضمن جملة الدالات الموجية الجائزة فيزيائياً ، فإن المؤثرين **متكافئان** :

$$Q \equiv R \qquad (6-27)$$

وعلى العكس، تضمن المعادلة المؤثرية (6-27) المعادلة(6-26)لأجل أية دالة ψ_j من جهة الدالاّت المقبولة فيزيائياً.

مبرهنة 6 . إذا كان ملحوظان اثنان متلائمين فإن مؤثريها متبادلان .

البرهان :

$$S\psi_j = s_j\psi_j, \qquad R\psi_j = r_j\psi_j \qquad (6-28)$$

ولذلك فإن :

$$(RS - SR)\psi_j = 0 \qquad (6-29)$$

و :

$$(RS - SR)\sum_j c_j\psi_j \equiv (RS - SR)\psi = 0 \qquad (6-30)$$

وبحكم مدّ الفرضية 4 ، تستطيع ψ أن تكون دالة كيفية من صفّ ذات الأهمية في ميكانيك الكم . وبناءً عليه ، تضمن المعادلة (6-30) عملية المبادلة بين المؤثرين R وS :

$$[R, S] \equiv RS - SR = 0 \qquad (6-31)$$

والتعبير $RS - SR$ يعرف باسم مبدّل المؤثرين R وS .

مبرهنة 7 . إذا كان المؤثران Q وR متبادلين وإذا كان Q أو R يملك قيماً مميزة غير مفككة ، فإن دالاته المميزة هي أيضاً دالات مميزة للمؤثر الآخر .

البرهان :

$$Q\psi_j = q_j\psi_j \qquad (6-32)$$

حيث يفترض أن q غير مفككة ؛ وعندئذ تنتج المعادلة :

$$Q(R\psi_j) = q_j(R\psi_j) \qquad (6-33)$$

مباشرة عن المعادلة (6-32) ، وذلك بعد ضربها بالمؤثر R والاستفادة من علاقة المبادلة. ومن جهة اخرى، تؤكد المعادلة(6-33) أن الدالة $R\psi_j$ هي دالة مميزة للمؤثرQ ولكن يفترض بالمؤثر Q هو أن قيمه المميزة غير مفككة حصراً. بالتالي، تستطيع الدالة $R\psi_j$ أن تختلف عن الدالة المميزة الأصلية ψ_j ، في اقصى حد بعامل جداء ثابت، أي أن:

$$R\psi_j = r_j\psi_j \qquad (6-34)$$

ويبين هذا أن الدالة الموجية ψ_j هي، في الوقت ذاته، دالة مميزة للمؤثرين R و S كليهما. ويجب أن نلاحظ أيضاً أن عناصر جملة الدالات ψ_j متعامدة.

مبرهنة 8 . إذا كان Q وR مؤثرين متبادلين أحدهما مع الآخر، فإنه توجد جملة تامة من الحالات الذاتية والتي هي، في الوقت ذاته، حالات ذاتية لـ Q و R كليهما.

لقد عولجت حالة القيمة المميزة غير المفككة للتوّ. وهنا ستوضع في الحسبان حالة تفكك القيمة المميزة. ولنفترض أن:

$$Q\psi_j = q\psi_j \qquad (6-35)$$

حيث q قيمة مميزة لـ Q ومرتبة تفككها تساوي m . بتأثير R في المعادلة (6−35)، وبالاستفادة من علاقة المبادلة ، نتوصل إلى :

$$Q(R\psi_j) = q(R\psi_j) \qquad (6-36)$$

من شكل المعادلة يتضح أن الدالة $R\psi_j$ هي دالة مميزة لـ Q ويمكن ،ووفقاً لمبرهنة سابقة ، نشرها بوساطة جملة الدالات ψ_j . وبالتالي :

$$R\psi_j = \sum_{k=1}^{m} q_{jk}\psi_k \qquad (6-37)$$

وبعد ضربها بـ c_j ، وإجراء عملية الجمع ، تؤول هذه المعادلة إلى :

$$R\sum_{j=1}^{m} c_j\psi_j = \sum_{j,k} c_j q_{jk}\psi_k \qquad (6-38)$$

لنفترض الآن أن :

$$\sum_j c_j q_{jk} = rc_k \qquad (6-39)$$

فإن هذه الصيغة تشكل جملة من m معادلة ذات m مجهولاً،وهي c_j ، ولهذه المعادلات حل يختلف عن الصفر بالنسبة لـ c_k ، بشرط أن يحقق الثابت r المعادلة المميزة:

$$\det(q_{jk} - r\,\delta_{jk}) = 0 \qquad (6-40)$$

يتكون محدّد (مُعيّن) المعادلة من رتل الأعداد q_{jk}، وذلك بعد طرح r من كل عدد يقع على قطر المحدّد. ويقود نشر هذا المحدّد إلى معادلة من الدرجة m بالنسبة لـr، فلها بالتاليm جذراً، ويرتبط مع كل جذر r_k حل $c^{(k)}$ لأجل الثوابتc. بعد التعريف:

$$u_k \equiv \sum_j c_j^{(k)}\psi_j \qquad (6-41)$$

والتعويض في المعادلات السابقة ، نتوصل إلى :

$$\mathrm{R}u_k = r_k u_k, \qquad \mathrm{Q}u_k = q_k u_k \tag{6-42}$$

تكون الدالات المعطاة بالمعادلة (6-41)، وعددها m، مستقلة خطياً، وليست القيم المميزة r_k جميعها متساوية بالضرورة. لهذا يمكن تطبيق الإجراء السابق على أية قيمة مميزة لـ Q، مفككة كانت أم غير مفككة، بحيث تكون النتيجة:

$$\mathrm{R}u_k = r_k u_k, \qquad \mathrm{Q}u_k = q u_k \tag{6-43}$$

لهذا، تشكل الدالات u_k جملة تامة من الدالات المميزة المشتركة لكل من R وQ في آن واحد. • يكن الحصول على جمله تامه متعامدة ومستنظمة، من الدالات،انطلاقاً من u_k ، وبالاستفادة من أجراء شميدت للتعامد.

إفترضنا أثناء الشرح السابق، ولأجل التبسيط ، أن الدالات التي كنا نتعامل معها (أي الدالات المميزة وكذلك الدالات الموجية المنشورة بوساطة الدالات المميزة)جميعهاكانت مستنظمة .وكما افترضنا أيضاً أن القيم المميزة تكون فقط قيماً متقطعة . وهذان الافتراضان ليسا ، في الواقع ، مستقلين ، بل هما مترابطان صميمياً . وهذا ما يمكن تبيانه بمثال بسيط .

لنأخذ الأمواج الصوتية التي تنعكس جيئة وذهاباً داخل رنّان مجوّف. وتشكل الترددات الطبيعية لتذبذب تجويف كهذا جملة متقطعة. وبما أن حجم التجويف نهائي، فإن مكاملة مربع السعة، داخل هذا التجويف تسفر عن عدد نهائي. ومن الجهة الأخرى، إذا تصورنا التجويف يمتد بدون تقييد، فستتحول سلسلة الترددات الطبيعية داخل التجويف إلى توزيع متصل للترددات. وفي الوقت ذاته، فإن تكامل مربع سعة الموجة داخل التجويف يصبح لانهائياً (إذا كانت سعة الموجة ليست صفراً في جميع الأماكن). وبناءً عليه، نجد أن استنظام الدالات المميزة وتقطع القيم المميزة مترابطان في هذه الحالة، بحيث ينتج أحدهما عن الآخر. ويبين الاستقصاء الأوثق أن هذا يصح أيضاً على الحالة العامة في ميكانيك الكم.

كتعميم للعرض الذي سبق ، سننظر الآن في حالة التوزيع المتصل للقيم المميزة .وفعلياً ، يجب أن يتمتع المؤثر بمدى من القيم تكون القيم المميزة فيه متصلة وبمدى آخر تشكل القيم المميزة فيه جملة متقطعة . وقد درسنا للتو حالة القيم

المتصلة في مثالين : مثال المؤثرات المرافقة لقياس موضع الجسيم ، ومثال المؤثرات المرافقة لقياس زخم الجسيم والتي تتخذ قيمها المميزة مدى متصلاً . وسنذكر أن الدالات المميزة الناجمة كانت غير مستنظمة. وتشكل هاتان الحالتان، وتحديداً حالة الدالات المميزة للزخم، مثالاً ملائماً يمكن استخدامه كمرشد أثناء مناقشة الحالة العامة.

يمكن تعميم جميع المبرهنات،والتي تم إثباتها خلال هذا الفصل، ولأجل حالة التقطع، على حالة التوزيع المتصل للقيم المميزة، وذلك بعد إدخال تعديلات طفيفة فقط. مثلاً: يمكن أن تكتب معادلة القيم المميزة على الشكل التالي:

$$Q\psi_q = q\psi_q \qquad (6-44)$$

وهنا نجد أن القيمة المميزة q، والتي تتخذ توزيعاً متصلاً من القيم، قد استخدمت أيضاً كمؤشر يرمز إلى الدالة المميزة التي ترافقهاq.وتتخذ مبرهنة التعامد بين الدالات المميزة الموافقة لقيم مميزة مختلفة شكل المعادلة التاليـة:

$$\int \overline{\psi_{q'}}\psi_q \, dr = 0, \qquad q \neq q' \qquad (6-45)$$

وعندما يتساوى كل من q' وq يتباعد التكامل، إذ من المعروف أن الدالة الموجية غير مستنظمة. ويطرح هذا مسألة الاستفادة من عملية إيجاد النهاية، والتي استخدمها أثناء مناقشة دالة دلتا، مما يمكننا من تعريف تكامل التعامد:

$$\int \overline{\psi_{q'}}\psi_q \, dr = \delta(q - q') \qquad (6-46)$$

وهو تكامل له معنى فقط بفضل عملية إيجاد النهاية ،وبمايشابه الحالة التي نوقشت في الفصل الرابع .

على نحو مماثل ، يمكن أن نكتب فرضية النشر لأجل حالة التوزيع المتصل للقيم المميزة ، كالآتي :

$$\psi = \int u(q)\psi_q \, dq \qquad (6-47)$$

إذا كان للمؤثر Q ـ كما يصدف أحياناً ـ نطاقان من القيم المميزة ، أحدهما متصل والآخر متقطع ، فإن فرضية النشر تكتب هكذا :

$$\psi = \sum_q u_q \psi_q + \int u(q) \psi_q \, dq \qquad (6-48)$$

حيث تجري عملية الجمع في لانطاق المتقطع من القيم المميزة وعملية المكاملة على النطاق المتصل . ويفترض أن الدالة الموجية ψ قابلة للاستنظام على الواحدة :

$$\int |\psi|^2 \, dr = \sum_q |u_q|^2 + \int |u(q)|^2 \, dq = 1 \qquad (6-49)$$

سوف نستعرض هذه المعادلة مع مثال يتضمن نطاقاً متصلاً من القيم المميزة . لنفترض أن المؤثر Q يوافق زخم الجسيم في الاتجاه X . من أجل تجنب الصعوبات المرتبطة المتعلقة بتفكك القيمة المميزة ستتجاهل الاحداثيين Y وZ . في هذه الحالة الخاصة سنفترض أن الدالة الموجية الكيفية قابلة للاستنظام ويمكن نشرها على شكل تكامل ، كما في المعادلة (6−47). هكذا ندخل الدالات الموجية للزخم ، المستنظمة بمفهوم المعادلة (6−46)، حيث :

$$\psi_p(x) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right) \qquad (6-50)$$

ومن السهل بمكان تبيان أن هذه الدالات تحقق المعادلة (6−46) ، وأن تعويضها في (6−47) يؤدي الى :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} u(p) \psi_p(x) \, dp \qquad (6-51)$$

حيث يمكن كتابة التحويل المعاكس على الشكل :

$$u(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{u_p}(x) \psi(x) \, dx \qquad (6-52)$$

واذا كان المربع المطلق للمعادلة (6−51) قابلاً للمكاملة على كل قيم X ، سنحصل على :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} |u(p)|^2 \, dp = 1 \qquad (6-53)$$

وبناءً على مناقشة سبقت ، يتناسب مربع القيمة المطلقة u طرداً مع احتمالية العثور على قيمة زخم معينة بالنسبة لواحدة للزخم اذا كان القياس يجري في الزمن

نفسه قيد البحث . ويُبيِّن الاحتكام الى المعادلة (6−53) بوضوح أن الدالة $u(p)$ هي ، في الواقع ، مستنظمة بشكل صحيح لكي تعطي الاحتمالية بالنسبة لواحدة الزخم مباشرة .

تكون العلاقات من طراز المعادلة (6−46) والعلاقة الموافقة للدالات المميزة المرافقة للقيم المميزة المتقطعة ، مماثلةً للعلاقة المعروفة باسم **علاقة الاغلاق** . وبغية الحصول على هذه العلاقة ، سننظر في نشر دالة موجية كيفية بلغة الدالات المميزة لمؤثر معين ، كما في المعادلة (6−48) :

$$\psi(r) = \sum_q u_q\psi_q + \int u(q)\psi_q\, dq \qquad (6-54)$$

فاستخدام صفة التعامد لهذه الدالات المميزة يعطي :

$$\int \overline{\psi_q}\psi\, dr = u_q \quad \text{or} \quad u(q) \qquad (6-55)$$

واذا عوضنا ذلك في المعادلة (6−54) ، وبادلنا اشارتي التكامل والجمع بالأماكن ، سنحصل على :

$$\psi(r) = \sum_q \left[\int \overline{\psi_q}\psi\, dr'\right]\psi_q(r) + \int\left[\int \overline{\psi_q}\psi\, dr'\right]\psi_q\, dq \qquad (6-56)$$
$$= \int\left[\sum_q \overline{\psi_q}(r')\psi_q(r) + \int \overline{\psi_q}(r')\psi_q(r)\, dq\right]\psi(r')\, dr'$$

وواضح من شكل هذه المعادلة أن التعبير الوارد بين قوسين تحت اشارة التكامل هو ، ببساطة ، دالة دلتا :

$$\sum_q \overline{\psi_q}(r')\psi_q(r) + \int \overline{\psi_q}(r')\psi_q(r)\, dq = \delta(r - r') \qquad (6-57)$$

وهذه هي **علاقة الاغلاق** . ويجب أن نلاحظ أنه لو كنا ندرس فقط نطاقاً متصلاً من القيم المميزة للمؤثر Q ، لكان هذا التعبير مشابهاً للمعادلة (6−46) مع تغير في دور متغير المكاملة ، فهو في حالةٍ ، دليل ، وفي الحالة الأخرى مضمون الدالة .

الفرضية 5 . اذا كان النظام الفيزيائي يوصَّف بوساطة دالة موجية ψ فان القيمة المتوقعة لأي ملحوظ q يرافقه المؤثر Q تعطى بالعلاقة :

$$\langle q\rangle = \int \bar{\psi} Q\psi\, dr \qquad (6-58)$$

ولقد بيّنّا معقولية هذه الفرضية في الفصول السابقة ، وتحديداً في الفصل الخامس .
وبهدف رؤية مغزاها بجلاءأكبر ، سننشر الدالة الموجية بوساطة الدالات المميزة للمؤثر
وبما يتفق مع فرضية النشر :

$$\psi = \sum_j c_j \psi_j, \qquad Q\psi_j = q_j \psi_j \qquad (6-59)$$

ويفترض أن الدالة الموجية ψ قابلة للاستنظام وهي مستنظمة على الواحدة وكما رأينا ، فان الدالات المميزة المعطاة في المعادلة (6−59) متعامدة إحداهما مع الأخرى أو ـ على الأقل ـ يمكن اختيارها بحيث تكون متعامدة ولذا سنفترض أن ذلك قد حصل ثم لنفترض لاحقاً أن كلاً من الدالات المميزة قابلة للاستنظام ومستنظمة على الواحدة . ويمكن التعبير عن الطابع التعامدي الاستنظامي للدالات ψ_j كما في السابق بوساطة العلاقة :

$$\int \overline{\psi}_j \psi_k \, d\tau = \delta_{jk} \qquad (6-60)$$

وبما أن ψ مستنظمة ، فباستخدام المعادلة (6−59) يمكن أن نكتب :

$$\int \overline{\psi}\psi \, d\tau = \sum_{j,k} \overline{c_j} c_k \int \overline{\psi_j}\psi_k \, d\tau = \sum_{j,k} \overline{c_j} c_k \, \delta_{jk} = 1, \qquad (6-61)$$

$$\sum_j |c_j|^2 = 1$$

وعلى نحو مماثل يمكن تعويض المعادلة (6−59) في المعادلة (6−58) لتعطي :

$$\langle q \rangle = \sum_j q_j |c_j|^2 \qquad (6-62)$$

من هذه العلاقات واضح أنه من الممكن والمعقول أن يتم تفسير $|c_j|^2$ كونه احتمالية العثور على النظام في الحالة المرمز اليها بالمؤشر j . وبالتالي ، فان احتمالية الحصول على النتيجة q ، وفي قياس يجري لمعرفة q_j ، تساوي :

$$P_j = |c_j|^2 \qquad (6-63)$$

واذا كانت النتيجة q_j قيمة مميزة مفككة فان احتمالية الحصول عليها تستخرج بوساطة إجراء الجمع في المعادلة (6−63) لأجل جميع المؤشرات j الموافقة لهذه القيمة المميزة المعينة . وان استخدام الصفة التعامدية الاستنظامية للدالات المميزة

ψ_j والمعادلة (59−6) يجعل من السهل الحصول على تعبير جليٍّ لأجل الاحتمالية بالشكل التالي :

$$c_j = \int \overline{\psi}_j \psi \, dr, \qquad (6-64)$$

$$P_j = |c_j|^2 = \left| \int \overline{\psi}_j \psi \, dr \right|^2$$

الفرضية 6 . بفرض أن النظام الفيزيائي يبقى دون اضطراب ، ويتحدد التغير الزمني للدالة الموجية ψ ـ التي تملك شكلاً معطى في لحظة الزمن الابتدائية ـ وفقاً لمعادلة شرودينغر :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \qquad (6-65)$$

حيث يتشكل مؤثر هاملتون H على أساس دالة هاملتون الكلاسيكية عن طريق استبدال الملحوظات الكلاسيكية بما يوافقها من مؤثرات .

الفرضية 7 . المؤثرات في النظرية الكماتية تكون على نحو ، بحيث أن مبدلاتها تتناسب طرداً مع أقواس بواسون الكلاسيكية المعنية وبما يتفق مع الوصفة التالية :

$$[Q, R] \equiv (QR - RQ) \rightleftharpoons i\hbar \{q, r\} \qquad (6-66)$$

حيث $\{q, r\}$ هو قوس بواسون الكلاسيكي للملاحظَيْن q و r . ويجب استبدال جميع المتغيرات وحيثما وجدت في قوس بواسون بالمؤثرات .

يجب أن نبدي ملاحظتين فيما يتصل بهذه الفرضية ، إذ يجب التعبير عن كل من الاحداثيات والزخم في جملة الاحداثيات الديكارتية . كذلك ، وفي حالات معينة ، يمكن أن تنشأ مظاهر الالتباس المتصل بالعوامل غير المتبادلة ، وهذا ما يتم حله عادة بتذكر الصفة الهرميتية التي يجب أن يتميز بها المؤثر . ونظراً لهذه التقييدات والالتباسات يتعين النظر الى هذه « الفرضية » على أنها مرشد مفيد أكثر من كونها فرضية أساسية في ميكانيك الكم . وحين يكون Q و R دالتين تابعتين لـ r و q بحيث تؤدي المعادلة (66−6) الى نتيجة التباسية ، يمكن تقدير المبدِّل بالانطلاق مباشرة من المبدِّل $[P, r]$ انظر المعادلة (10−8) ، كمثال على التقنيات الجبرية ، التي

يتم استخدامها لهذه الغاية .

هناك مثال على الالتباس في المؤثرات تقدمه دراسة دالة هاملتون في المعادلة (52 −5) في حالة جسيم مشحون في المجال الكهرمغنطيسي :

$$H = \frac{[\mathbf{P} - (q/c)A]^2}{2m} + q\phi \qquad (6-67)$$

وبعد النشر ، تستحيل هذه المعادلة الى :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{q}{mc}\,\mathbf{P}\cdot A + \frac{q^2}{2mc^2}\,A^2 + q\phi \qquad (6-68)$$

إن الحد الثاني في هذه المعادلة كان يمكن كتابته بالقدر نفسه من الدقة على شكل $-(q/mc)A\cdot\mathbf{P}$. ويجري حل هذا الالتباس بكتابة المعادلة (6−68) على النحو التالي :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{q}{2mc}\,(\mathbf{P}\cdot A + A\cdot\mathbf{P}) + \frac{q^2}{2mc^2}\,A^2 + q\phi \qquad (6-69)$$

حيث يرى بوضوح أن المؤثر H هرميتي ، وذلك خلافاً عن المعادلة (6−68) قد تبدو الفرضية 7 غريبة . ولكن لنلاحظ ، وبوساطة التعويض المباشر أن الفرضية 7صحيحة بالنسبة لمركّبات r و q الستّ مأخوذة ضمن أي تركيب وكذلك بالنسبة لأية قوة صحيحة موجبة تُرفَع اليها كل من مركبة r ومركبة q والعكس بالعكس .

في الفصل الثامن ، وحين ستجري دراسة المدى الزمني لتغير القيم المتوقعة سوف نجد أن هذه الفرضية تمثل جسراً هاماً بين الميكانيك الكلاسيكي وميكانيك الكم . وسوف يتم توضيح المدلول الفيزيائي لهذه الفرضية عندئذٍ .

6−2 الطرائق الجبرية .

سبق أن بيّنا أنه يمكن التصرف بالمؤثرات التي نصادفها في شكلانية ميكانيك الكم بوساطة استخدام قواعد الجبر التجميعي ولكن غير التبادلي . وهذا ما يوحي بأن جبر المؤثرات يمكن أن يلعب دوراً هاما في عرض الشكلانية الكمّاتية ، وهدف هذه الفقرة هو استقصاء هذا الدور على نحو أكثر كمالاً . وبالفعل تكون هذه المفاهيم الجبرية أساسية للشكلانية المذكورة . وبهدف الايضاح سنأخذ مرة أخرى المتذبذب

التوافقي الخطي وسنستعرض الآن كيفية تحديد حالات الطاقة الممكنة بوساطة تقنيات جبرية بأكملها تقريباً .

يعطى مؤثر هاملتون للمتذبذب التوافقي الخطي بالصيغة التالية :

$$H = \frac{1}{2m} P_x^2 + \frac{k}{2} x^2 \qquad (6-70)$$

ومرة أخرى سنتجاهل الحركة في الاتجاهين y و z وأن معادلة القيمة المميزة هي :

$$Hu_n = E_n u_n \qquad (6-71)$$

ومعادلة شرودينغر التابعة زمنياً هي :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \qquad (6-72)$$

وحلها العام من الطراز

$$\psi = \sum_n c_n u_n \exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar} t\right) \qquad (6-73)$$

تكمن المسألة قيد الدراسة في إيجاد القيم المميزة للمعادلة (6-71) والدالات المميزة الموافقة لها ولنتابع بتجزئة المؤثر H الى عاملين ولنعرِّف أولاً مؤثرين لا هرميتيين هما :

$$R_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2m}} P_x \pm i \sqrt{\frac{k}{2}}\, x \qquad (6-74)$$

يكون كل من هذين المؤثرين القرين العقدي للآخر مما يعني أنه لأجل أية دالتين u و v سلوكهما معقول يحقق المؤثران المعادلة التالية :

$$\int \bar{u} R_+ v \, dr = \int \overline{(R_- u)} v \, dr \qquad (6-75)$$

واذا ضربنا المؤثرين في المعادلة (6-74) بتعاقب مختلف نحصل على :

$$R_+R_- + \tfrac{1}{2}\hbar\omega = R_-R_+ - \tfrac{1}{2}\hbar\omega = H \qquad (6-76)$$

حيث استخدمت علاقة المبادلة الناجمة عن المعادلتين (5-59) و (6-66) أي أن :

$$[P_x, x] = -i\hbar \qquad (6-77)$$

وانطلاقاً من المعادلة (76−6) نحصل على علاقات المبادلة :

$$[R_+, R_-] = -\hbar\omega \qquad (6-78)$$

و :

$$[H, R_\pm] = \pm\hbar\omega R_\pm \qquad (6-79)$$

ومن الواضح ، ولاعتبارات فيزيائية ، أن أية نظرية معقولة للمتذبذب التوافقي البسيط من شأنها أن تعطي قيماً لطاقة المتذبذب بحيث تكون ايجابية طالما أن الطاقة تساوي مجموع عاملين موجبين مضروبين أحدهما بمربع الزخم والآخر بمربع الموضع . ومن الطريف أن نلاحظ أنه يمكن الحصول على هذه النتيجة انطلاقاً من افتراضات بسيطة جداً في جبر المؤثرات . ولنأخذ الحد الثاني في الطرف الأيمن من المعادلة (70−6) : x هو مؤثر هرميتي ، ويمكن أن تكون له فقط قيم مميزة حقيقية . وبالتالي فان مربع x يمكن أن يتخذ فقط قيماً مميزة حقيقية . وبالطريقة ذاتها يمكن لمربع x أن يتخذ فقط قيماً مميزة حقيقية وموجبة . وبناءً عليه ، يمكن أن تكون القيم المتوقعة للطاقتين الحركية والكامنة ـ وبالتالي لدالة هاملتون ـ موجبة فقط . واذا كانت القيم المتوقعة لدالة هاملتون تستطيع أن تكون فقط ايجابية ، فان طريقة المتذبذب التوافقي البسيط يمكنها فقط أن تكون ايجابية (أو قد تكون صفراً) . وهذا يعني أنه لايمكن أن تكون هناك حالات طاقية سالبة للمتذبذب التوافقي البسيط .

بما أن المتذبذب التوافقي يملك حالات طاقية موجبة فقط (قد تكون صفرية) ، فمن الجلي أنه يجب أن يوجد تخم سفلي لطاقة المتذبذب البسيط . ولنفترض أن E_0 تمثل الطاقة السفلى التي يمكن أن يتخذها المتذبذب التوافقي ، وأن الدالة الموجية الموافقة تتمثل بـ u_0 . وتحقق هاتان الكميتان معادلة القيمة المميزة :

$$Hu_0 = E_0 u_0 \qquad (6-80)$$

من غير المعروف ، حتى هذه اللحظة ، ما اذا كانت الدالة الموجية u_0 وحيدة ، بمعنى أنه من غير المحدد بعد اذا ما كان مستوى الطاقة E_0 مفككاً . ويؤدي ضرب الحد الأيسر من المعادلة (80−6) بالمؤثر R_- الى :

$$R_- H u_0 = E_0 R_- u_0 \qquad (6-81)$$

وبالاستفادة من علاقة المبادلة (6−79) نحصل على :

$$H(R_- u_0) = (E_0 - \hbar\omega)(R_- u_0) \qquad (6-82)$$

ويجب أن نلاحظ أن هذه المعادلة ، من حيث الشكل ، معادلة القيم المميزة (6−71) بقيمة مميزة جديدة هي $E_0 - \hbar\omega$ وبدالة مميزة جديدة هي $R_- u_0$. ومن ناحية أخرى ، وبفرض أن E_0 القيمة المميزة الدنيا يشير الى أن هذا الحل يمكن أن يكون فقط حلاً صفرياً لمعادلة القيم المميزة وبالذات الى أن الدالة الموجية يجب أن تتلاشى في جميع الأماكن وبالتالي :

$$R_- u_0 = 0 \qquad (6-83)$$

واذا ضربنا هذه المعادلة بالمؤثر R_+ ، وبالاستفادة من (6−76) نحصل على العلاقتين :

$$R_+ R_- u_0 = 0, \qquad (H - \tfrac{1}{2}\hbar\omega)u_0 = 0 \qquad (6-84)$$

تتمتع العلاقة الثانية بشكل معادلة القيمة المميزة ، وهي تسفر عن القيمة المميزة الدنيا للطاقة E_0 :

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad (6-85)$$

وعلى نحو مماثل ، اذا تم ضرب المعادلة (6−80) بـ R_+ واستخدمت علاقة المبادلة (6−79) يمكن الحصول على المعادلة :

$$H(R_+ u_0) = (E_0 + \hbar\omega)(R_+ u_0) \qquad (6-86)$$

ويمكن تكرار هذا الاجراء مرة تلو الأخرى من خلال الضرب بـ R_+ ، مما يؤدي الى :

$$H(R_+^n u_0) = (E_0 + n\hbar\omega)(R_+^n u_0) \qquad (6-87)$$

وتسفر هذه المعادلة للقيم المميزة عن جملة من القيم المميزة والدالات المميزة للمؤثر H ، والتي تتحدد بالمعادلة :

$$u_n = c_n R_+^n u_0, \quad E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \qquad (6-88)$$

حيث c_n — يتم اختيارها بما يضمن استنظام الدالات المميزة u_n ويسمى المؤثران R + و R – مؤثري المرقاة ، وذلك لأنهما يحولان الدالة المميزة لمؤثر هاملتون الى دالة مميزة أخرى موافقة لقيم مميزة أعلى أو أدنى على التوافق أي أنهما يؤلِّدان كامل متتالية القيم المميزة واذا كتبت المعادلة (83–6) ، بشكلها الصريح سنحصل على :

$$\left(\frac{d}{dx} + \frac{k}{\hbar\omega}\, x\right) u_0 = 0 \qquad (6-89)$$

وهذه معادلة تفاضلية بسيطة تملك حلاً هو :

$$u_0 = \left(\frac{k}{\pi\hbar\omega}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{kx^2}{2\hbar\omega}\right) \qquad (6-90)$$

لقد تم اختيارنا العامل الثابت هنا ليضمن استنظام u_0 ، ويجب أن نلاحظ أن هذا الحل وحيد . وبالتالي هناك دالة مميزة وحيدة توافق معادلة القيمة المميزة (85 –6) وأن القيمة المميزة المعنية غير مفككة . وبطريقة مشابهة ، نجد أن جميع القيم المميزة المعطاة بالمعادلة (88–6) غير مفككة ، وأن الدالات المميزة الموافقة لها يتم توليدها بوساطة R + حصراً . ولو لم يكن الأمر كذلك لكان بوسع المرء وبالاستخدام الناجح لـ R – أن يولِّد دالة مميزة مقترنة بـ E_0 بحيث تكون مستقلة عن u_0 ولكان من شأن ذلك أن يتنافى مع الاستنتاج السابق بأن u_0 وحيدة . هذا اضافة إلى أن جملة القيم المميزة ، والمعطاة بالمعادلة (88–6)، تمثل جميع القيم المميزة وذلك لأنه لو كان هناك أية قيم مميزة أخرى ليست من عناصر هذه الجملة فإن التطبيق الناجح لمؤثر المرقاة – R على الدالة المميزة المعنية كان من شأنه أن يقودنا الى تخم أدنى بالنسبة لجملة القيم المميزة يختلف عن التخم المعطى في (85–6) والذي وجدنا أنه وحيد .

يجب أن نلاحظ أنه طالما المؤثر R + مؤثر وتري ، حيث تتغير إشارته عند انعكاس Xبالنسبة لمركز الاحداثيات وطالما أن الدالة المعطاة بالمعادلة (90–6) هي دالة شفعية فإن دالات المعادلة (88–6) هي إما شفعية كلها أو وترية كلها مما يتوقف على كون n عدداً شفعياً أو وتريا ثم إن الثوابت C_n في المعادلة (88–6) قد تم اختيارها بحيث تكون الدالات المرجية مستنظمة على الواحدة

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n|^2\, dx = 1 \qquad (6-91)$$

يمكن بوساطة المعادلات (75–6) و (76–6) و (88–6) استخدام تقنية جبرية صرف لتقدير هذه المعاملات ، وذلك كما يلي :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n|^2\, dx = 1 \tag{6-92}$$

$$= \left|\frac{c_n}{c_{n-1}}\right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \overline{u_{n-1}}\, R_- R_+ u_{n-1}\, dx$$

$$= n\hbar\omega \left|\frac{c_n}{c_{n-1}}\right|^2$$

لذلك :

$$|c_n|^2 = |c_{n-1}|^2 \frac{1}{n\hbar\omega}; \qquad c_0 = 1, \qquad c_n = \left(\frac{1}{n!}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{n/2} \tag{6-93}$$

وبمقدورنا أيضاً الاستفادة من تقنيات جبر المؤثرات وذلك بغية تقدير قيم متوقعة محددة لأجل المتذبذب التوافقي الخطي . فمثلاً ولأجل أن نحسب القيمة المتوقعة للطاقة الحركية للمتذبذب سنستخدم المؤثر :

$$\tfrac{1}{4}(R_+^2 + R_-^2) + \tfrac{1}{2}H = \frac{1}{2m} P_x^2 \tag{6-94}$$

وحين تكون الدالة الموجية هي u_n يمكن كتابة القيمة المتوقعة لهذا المؤثر كما يلي :

$$\left\langle \frac{1}{2m} p_x^2 \right\rangle_n = \int \overline{u_n}[\tfrac{1}{4}(R_+^2 + R_-^2) + \tfrac{1}{2}H] u_n\, dx \tag{6-95}$$

وينتمي هذا التكامل الى الطراز الذي يظهر كثيراً ، ولذا فمن المفيد أن نصطلح على ترميز تبسيطي . فمثل هذا التكامل سوف يكتب على النحو المختزل التالي :

$$(u, v) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \bar{u} v\, dx. \tag{6-96}$$

ويمكن تُعميم هذا التعريف الجزئي بسهولة ليشمل حالة تكامل على مجمل الفراغ قيد البحث ، وهو قد يكون أحادي الأبعاد أو ثلاثي الأبعاد أو حتى ذا nبعداً . وإذا استخدمنا هذا الترميز فان القيمة المتوقّعة لأجل الطاقة الحركية للمتذبذب

التوافقي الخطي في حالته ذات العدد الكمي n ، يمكن كتابتها على النحو الآتي :

$$\left\langle\frac{1}{2m}\,p_x^2\right\rangle_n = (u_n, [\tfrac{1}{4}(R_+^2 + R_-^2) + \tfrac{1}{2}H]u_n) \qquad (6-97)$$

ويمكن تقدير الحد الأول في الطرف الأيمن كما يلي :

$$\left(u_n, \frac{1}{4}\,R_+^2 u_n\right) = \frac{1}{4}\,\frac{c_n}{c_{n+2}}\,(u_n, u_{n+2}) = 0 \qquad (6-98)$$

وتساوي هذه المعادلة الصفر بحكم تعامد الدالات الموجية u_n وعلى نحو مماثل ، يمكن تبيان أن الحد الثاني أيضاً يساوي الصفر ؛ وبالتالي فإن المعادلة (97-6) تُختزل لتصبح كالتالي :

$$\left\langle\frac{1}{2m}\,p_x^2\right\rangle_n = \langle\tfrac{1}{2}H\rangle_n = \tfrac{1}{2}(n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \qquad (6-99)$$

وهكذا فإن القيمة المتوسطة للطاقة الحركية للمتذبذب التوافقي الخطي تساوي نصف الطاقة الاجمالية للمتذبذب حين يكون الأخير في حالة ذات طاقة محددة . وهذا يوافق نتيجة الميكانيك الكلاسيكي ، التي تقتضي بأن الطاقة الحركية المتوسطة للمتذبذب التوافقي الخطي (وهي في هذه الحالة المتوسط الزمني !) تساوي نصف الطاقة الاجمالية . ولقد تم استخلاص المعادلة (99-6) فقط لأجل النظام الذي يقع في حالة ما ذات طاقة محددة . ومن المرغوب فيه حساب القيمة المتوقعة للطاقة الحركية حين يكون المتذبذب في حالة ليست ذات طاقة محددة ، أي في **حالة تراكب الطاقة** . وفي مثل هذه الحالة يمكن كتابة القيمة المتوقّعة على الشكل التالي :

$$\left\langle\frac{1}{2m}\,p_x^2\right\rangle = \left(\psi, \frac{1}{2m}\,P_x^2\psi\right) \qquad (6-100)$$

حيث :

$$\psi = \sum_n a_n \exp\,[-i(n + \tfrac{1}{2})\omega t]u_n \qquad (6-101)$$

وتؤدي هاتان المعادلتان الى :

$$\left\langle\frac{1}{2m}\,p_x^2\right\rangle = \sum_{n,n'} \overline{a_n}a_{n'}\,\exp\,[i(n - n')\omega t]\left(u_n, \frac{1}{2m}\,P_x^2 u_{n'}\right) \quad (6-102)$$

واذا أخذنا المتوسط الزمني كاملاً ، فإن الدالات التذبذبية سوف تتلاشى كلها في حالات $n \neq n'$ ، وتعطي بذلك القيمة المتوقعة لمؤثر الطاقة الحركية :

$$\overline{\left\langle \frac{1}{2m} p_x^2 \right\rangle} = \sum_n |a_n|^2 \left(u_n, \frac{1}{2m} P_x^2 u_n \right) \qquad (6-103)$$

وبالاستفادة من $(6-99)$ يمكن كتابة هذه المعادلة كالتالي :

$$\overline{\left\langle \frac{1}{2m} p_x^2 \right\rangle} = \frac{1}{2} \sum_n |a_n|^2 (u_n, \mathrm{H} u_n) \qquad (6-104)$$

$$= \tfrac{1}{2} \langle \mathrm{H} \rangle$$

وتتطابق هذه النتيجة ، مرة أخرى ، مع النتيجة الكلاسيكية التي تفيد بأن المتوسط الزمني للطاقة الحركية يساوي نصف الطاقة الاجمالية للمتذبذب .

وبطريقة مشابهة ، يمكن تقدير القيمة المتوقعة لزخم المتذبذب التوافقي الخطي في حالة ذات طاقة محددة فيها اذا استخدمنا العلاقة :

$$\mathrm{P}_x = \sqrt{\frac{m}{2}} \left(\mathrm{R}_+ + \mathrm{R}_- \right) \qquad (6-105)$$

ويقودنا هذا الى النتيجة التالية لأجل القيمة المتوقعة :

$$\langle p_x \rangle_n = 0 \qquad (6-106)$$

ويجب التأكيد بأن ما تضمنته هذه الفقرة من تقنيات خاصة بحساب الدالات الموجية والقيم المتوسطة لأجل المتذبذب التوافقي الخطي ، كانت وبشكل أساسي ، ذات طابع جبري ، وبضمن ذلك جبر المؤثرات . ولقد كانت المعادلة التفاضلية الوحيدة ، والتي كان من الضروري حلها المعادلة $(6-89)$ والتي كانت معادلة بسيطة جداً . ولقد جرى اشتقاق جميع الدالات الأخرى من حل هذه المعادلة ، وذلك من خلال استخدام تقنيات مؤثرَيْ المرقاة ، كما أن تقدير القيم المتوقّعة قد تم أيضاً بطريقة جبرية . ويشير هذا الى اهمية التقنيات الجبرية في ميكانيك الكم . لكن ، المسائل ، التي تقبل الحل بهذه الطريقة الأنيقة الجبرية الصرف ، قليلة جداً لسوء الحظ .

3-6 النُظُم متعددة الجُسَيْمات .

كنا نقوم حتى الآن باستعراض ميكانيك الكم بالنسبة لنظام يتكون من جسيم واحد يتحرك في مجال قوى ذي طراز معين . ولكن من الضروري الآن مد هذا الاستعراض الى حالة النظم عديدة الجسيمات فهذا المد يتمتع بالمشروعية . فمثلاً يمكن للمرء أن يكتب مؤثر هاملتون لأجل جسيمين كتلتاهما m1 و m2 على الشكل التالي :

$$H = \frac{1}{2m_1} P_1^2 + V(r_1) + \frac{1}{2m_2} P_2^2 + V(r_2) + V_{12}(r_1, r_2) \quad (6-107)$$

يتضمن مؤثر الزخم $\vec{P_1}$ مشتقات بالنسبة لاحداثيات الجسيم 1 الديكارتية ، ويتضمن المؤثر $\vec{P_2}$ مشتقات بالنسبة لاحداثيات الجسيم 2 الديكارتية . ومن الواضح أن مؤثر هاملتون يملك شكلاً يتوجب علينا عدّهُ شكل الطاقة الاجمالية لنظام من جسيمين ، ونعني تحديداً مجموع : أ) الطاقتين الحركيتين للجسيمين ، ب) طاقتي المفاعَلة V لكل من الجسيمين على حدة ، ج) طاقة المفاعَلة بين الجسيمين نفسيهما .

$$\psi = \psi(r_1, r_2, t) \quad (6-108)$$

ويجب ان نلاحظ انه بالكاد يمكن تفسير هذه الدالة على أنها موجة فيزيائية تتحرك في الفراغ العادي ثلاثي الأبعاد. فبما أن هذه الدالة هي قرينة الدالة الموجية للنظام وحيد الجُسَيْم، فمن الواضح أن الخواص الفيزيائية شبه الموجية، والتي تتكشف عنها الدالة الموجية لجُسَيْم منفرد، هي الخواص التي يجب ان تُنسَب فقط للنظام وحيد الجُسَيْم. بكلام آخر، تمثل ψ موجة فيزيائية فقط ضمن النطاق الذي يسمح بربطها مع حركة جُسَيمْات منفردة. ومن ناحية ثانية، تكون الدالة الموجية المعطاة بالمعادلة(6-108) مفيدة لأغراض الحساب، مثلها في ذلك مثل الدالة التي تم تعريفها سابقاً لأجل النظام وحيد الجُسَيْم. لهذا، يتوجب تفسير الدالة الموجية ليس على أنها موجة فيزيائية تتحرك عبر الفراغ، بل بالأحرى، على أنها دالة مفيدة في حسابات الاحتماليات، والتي تلزم أثناء تقدير القيم المتوقعة. ويتطلب المدّ الطبيعي لنظرية الجُسَيْم الواحد أن تتخذ معادلة شرودينغر الشكل التالي:

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (6-109)$$

ويتخذ شرط الاستنظام الذي مررنا به سابقاً الآن الصيغة التالية:

$$\int |\psi|^2 \, dr_1 \, dr_2 = 1 \qquad (6-110)$$

وعلى نحو مماثل يتخذ شرط التعامد بين دالتين الشكل التالي:

$$\int \overline{\psi_a} \psi_b \, dr_1 \, dr_2 = 0 \qquad (6-111)$$

إن التسويغ لمد الشكلانية الخاصة بنظرية الجُسَيْم الواحد إلى حالة جُسَيْمَيْنْ ، وبالطريقة المعروضة هنا ، يُبْقي على نتائج النظرية . مثلاً ، إذا كان مقدار التغير في إحداثي الموضع المتوسط للرزيمة الموجية ، بالنسبة لأحد الجُسَيْمَيْنْ ، يتم حسابه على النحو الآتي:

$$\frac{d}{dt}\langle x_1 \rangle = \frac{d}{dt}\int \overline{\psi} x_1 \psi \, dr_1 \, dr_2 \qquad (6-112)$$

وسيكون من السهولة بمكان ملاحظة أن استخدام كلاً من المعادلة (6-109) وقواعد الحساب الاعتيادية من شأنه أن يجعل معادلة الحركة الخاصة بمركز كتلة الرزيمة الموجية موافقة لمثيلتها المتوقعة من النظرية الكلاسيكية، وذلك - على الأقل - طالما يتعلق الأمر بالإحداثي المذكور، وهذا ما سنبيّنه بوضوح في الفصل الثامن. ويمكن ، بشكل مماثل ، تبيان أن جميع القيم المتوقعة تلبي معادلات للحركة ، مطابقةً للمعادلات الخاصة بالكميات الكلاسيكية الموافقة .

إذا كان نظام فيزيائي ما مكونٌ من جسيمَيْنْ ، على هيئة لاتستلزم المفاعلة بينهما ، فإن حدّ المفاعلة $V_{12}(r_1, r_2)$ في (6-107) سيغيب ، وعندئذٍ يمكن كتابة مؤثرهاملتون كالتالي :

$$H = H_1 + H_2 \qquad (6-113)$$

ويعود الرمزان H_1 و H_2 لمؤثري هاملتون الجُسَيْميَّين كلاً على حدةويجب ملاحظة أن H_1 و H_2 يبادل أحدهما الآخر :

$$[H_1, H_2] = 0 \qquad (6-114)$$

مما يشير الى ضرورة اختيار الدالات الموجية بحيث تكون دالات مميزة مشتركة بينهما ويقودنا الى النتيجة التي تفيد بأن الدالات المميزة للطاقة يمكن كتابتها بالشكل :

$$\psi = u_1(r_1) u_2(r_2) \qquad (6-115)$$

ومن هنا تكون معادلات القيمة المميزة هي :

$$H_1\psi = E_1\psi, \quad H_2\psi = E_2\psi, \quad H\psi = (E_1 + E_2)\psi \qquad (6-116)$$

ويجب أن نلاحظ من شكل المعادلة (6-115) أن القيمة المتوقعة لأية كمية متعلقة بالجسيم 1 مستقلة عن حالة الجسيم 2 والعكس صحيح ، فالجسيمان مستقلان تمام الاستقلال . وفيما يتعلق بنظم من هذا الطراز نجد أنفسنا أمام خيار : فقد نفترض أن النظام مكون من جسيمين أو أنه نظامان ، كلٌّ منهما وحيد الجسيم ، فالنتائج نفسها تترتب على الاعتبارين كليهما .

إن الشكلانية الخاصة بنظام من جسيمين والتي استعرضناها أعلاه ، تقبل بسهولة المدَّ الى حالة أي عدد من الجسيمات مما يؤدي بنا الى معادلة شرودينغر :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (6-117)$$

حيث يعطى مؤثر هاملتون الخاص بنظام من N جسيماً كالتالي :

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j} P_j^2 + V(r_1, r_2, \ldots, r_N) \qquad (6-118)$$

وعلى العموم تكون الدالة الموجية دالة تابعة للزمن في فراغ ذي 3N بعداً ، وهذا ما نرمز اليه هكذا :

$$\psi = \psi(r_1, \ldots, r_N, t) \qquad (6-119)$$

6-4خلاصة .

لقد تناول هذا الفصل على الأغلب ، مسائل شكلانية صرفاً بهدف متابعة تطويرنا للأدوات الرياضية اللازمة أثناء الاستعراض اللاحق لميكانيك الكم . وربما كانت النتيجة الفيزيائية الأكثر أهمية ، والتي يمكن استخلاصها من الاستعراض الشكلاني ، هي أن الدالات المميزة لأي واحد من المؤثرات الهرميتية Q المرافقة لكميات فيزيائية معينة توافق تلك الحالات ، التي تتخذ فيها الكمية الفيزيائية المعنية قيمة محددة بدقة . إن أية دالة لا على التعيين متميِّزة بمدلول فيزيائي يمكن نشرها بوساطة الدالات المميزة للمؤثر المعني ومما يسهِّل هذا النشر جزئياً ، كون جميع الدالات المميزة متعامدة فيما بينها .

ويكمن المغزى الفيزيائي لهذا النشر ، الذي تتعرض له الدالة الموجية الكيفية بوساطة الدالات المميزة لـ Q في أن النظام عندما لايكون في حالة موافقة لقيمة ما دقيقة التحديد من قيم الكمية الفيزيائية المعنية q فإنه (أي النظام) يقع في حالة تراكب خاصة بالكمية المذكورة ، حيث توافق كل دالة مميزة ضمن جملة النشر حالة معينة من الحالات الممكنة الناجمة عن قياس q وتتناسب احتمالية الحصول على نتيجة معينة طرداً مع مربع السعة الخاصة بالموجة المعنية ضمن التراكب ولذا فان حالات التراكب توافق حالات النظام عندما لاتكون قيمة ملحوظٍ ما محددة بدقة أو « مُستدِقّة » .

لقد جرى استعراض لأهمية الطرائق الجبرية في ميكانيك الكم من خلال معالجتنا لحالة المتذبذب التوافقي الخطي البسيط . وتم ادخال مؤثري المرقاة وتبيان قوة التقنيات القائمة على استعمالهما .

وأخيراً ، ورد نقاش موجز لمسألة مد الشكلانية الخاصة بميكانيك الكم الى حالة النظم متعددة الجسيمات .

مسائل

6–1 تنزلق خرزة كتلتها m دونما احتكاك على سلك مستقيم طوله a بين جدارين صلبين .

أ) ما هي مستويات الطاقة الخاصة بهذا النظام ؟ ب) بيِّن بوضوح أن الدالات الموجية الموافقة لمختلف الطاقات هي متعامدة فيما بينها . ج) احسب نسبة احتماليات أن تكون الحالات الطاقية المختلفة شاغرة اذا كانت عملية القياس تشير الى أن الخرزة تقع بالضبط في منتصف السلك .

يبيِّن قياس لاحق أن الخرزة ليست على النصف الأيمن من السلك .
هـ) ماهي الطاقة المتوسطة الأدنى $\langle H \rangle$الملائمة لهذا القياس ؟ و) ما هي الدالة الموجية الموافقة ؟ ز) ما هي ـ بالنسبة لنظام يقع في حالة الطاقة المتوسطة الأدنى هذه ـ احتمالية العثور على النظام في حالته الطاقية الدنيا ؟

6–2 أ) ناقش المدلول الفيزيائي لمعادلة القيمة المميزة في شكلانية ميكانيك الكم . ب) ما هو مدلول المؤثر ؟ ج) ومدلول القيمة المميزة ؟

د) ومدلول الدالة المميزة ؟ هـ) ما هو دور معادلة شرودينغر في هذه الشكلانية ؟ و) ما هو مدلول القيمة المتوقعة ؟

6-3 بيِّن أن الحل العام لمعادلة شرودينغر يمكن كتابته على النحو :

$$\psi(x, t) = \sum_n \left[\int \overline{u_n}(x') \psi(x', 0)\, dx' \right] u_n(x) \exp(-i\omega_n t)$$

حيث $u_n(x)$ هي واحدة من جملة الدالات المميزة للطاقة وهي متعامدة ومستنظمة ، بينما $\omega_n = E_n/\hbar$

6-4 يمكن الحصول على الدالات المميزة المستنظمة الخاصة بالطاقة في حالة المتذبذب التوافقي البسيط وحيد البعد من المعادلات (88-6) و (90-6) و (93-6) .
ويكون الحل العام لمعادلة شرودينغر الخاصة بالمتذبذب هو :

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n u_n(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$$

أ) استخلص القيمة المتوقعة$\langle x \rangle$من هذه الدالة الموجية العامة معبراً عن النتيجة كدالة تابعة لكل من an والزمن .

ب) ما هي $\langle x \rangle$ في الحالة الخاصة عندما $a_o= 1/\sqrt{2}$و $a_1= 1/\sqrt{2}$و $a_n= o$ عندما $n>1$ ؟

6-5 جسيم كتلته m مضطر للتحرك بين جدارين لانهائيين متوازيين تفصلهما مسافة D :

أ) ما هي طاقته حين يكون في حالته الطاقية الدنيا ؟ ب) يتم فجأة ابعاد أحد الجدارين عن الآخر لمسافة D بحيث يصبح البعد بين الجدارين 2D . افترض أن حركة الجدار تجري على قدرٍ من المفاجأة ، بحيث أن الدالة الموجية للجسيم ليس لديها فرصة للتغير اثناء حركة الجدار . ما هي احتمالية احتفاظ الجسيم بطاقته الأصلية ؟ ج) ما هي احتمالية أن يكون الجسيم قد فقد بعض الطاقة ؟ د) هل تغيرت القيمة المتوقعة للطاقة الحركية ؟ هـ) فسر هذه النتائج بمصطلحات النموذج الفيزيائي .

6-6 أ) اكتب المؤثر الهرميتي الخاص بجداء الزخم والموضع في حالة المتذبذب

التوافقي البسيط وحيد البعد . ب) بيِّن أن القيمة المتوقعة (القيمة المتوسطة) لهذه الكمية تساوي الصفر في أية حالة مستقرة من حالات المتذبذب .

6−7 أ) بيِّن أن مؤثر المرقاة R_+ في المعادلة (74−6) يمكن كتابته بالشكل

$$R_+ = u_0^{-1} \frac{P_x}{\sqrt{2m}} u_0$$

حيث u_0 الدالة المميزة للطاقة الموافقة للحالة الدنيا للمتذبذب التوافقي البسيط
ب) بمصطلحات مماثلة ما شكل R_- و R_+^n ؟ .

6−8 . − بيِّن أن العلاقة

$$R_- u_0(x+a) = i\sqrt{\frac{k}{2}}\, a u_0(x+a)$$

تتحقق لأجل حالة الطاقة الدنيا بالنسبة للمتذبذب التوافقي البسيط . يعطى المؤثر R_- بالمعادلة (74−6)

6−9 يتألف نظام من جسيمين كتلتهما M_1 و M_2 ويتحرك في منطقة غير محدودة ذات جهد ثابت . ويمكن توصيف المفاعلة بين الجسيمين بلغة الكمون الذي يكون دالة تابعة فقط للمسافة الفاصلة بينهما .

أ) اكتب مؤثر هاملتون لأجل هذا النظام بلغة متجهي الموضعين r_1 و r_2 ؟

ب) أَدخل إحداثيات جديدة : المتجه R ، الذي يعبر عن موضع مركز الكتلة في النظام ، والمتجه r الذي يعبر عن موضع الجسيم 2بالنسبة للجسيم 1 . بيِّن أنه يمكن فصل المتغيرات في معادلة شرودينغر ضمن جملة الاحداثيات الجديدة .

ج) حُل تلك المعادلة لأجل حركة مركز الكتلة . د) ما هو التفسير الفيزيائي للدالات المميزة الناتجة ؟

6−10 بيِّن أن كثافة الاحتمالية الخاصة بالمتذبذب التوافقي البسيط ، وبصرف النظر عن الدالة الموجية في لحظة $t = 0$ ، تقوم بحركة دورية دورها مساوٍ دور الذبذبة الكلاسيكية .

الفصل السابع

القياس

7-1 معنى القياس .

يكمن دور القياس في الفيزياء في الحصول على معلومات حول النظام الفيزيائي بقصد توصيف حالته الراهنة ، وكذلك التمكين من استقراء مستقبله . ويكفي في الميكانيك الكلاسيكي أن يعرف المرء ـ وفي لحظة معينة ـ مواضع الجسيمات المكونة للنظام قيد الدراسة وسُرَعها ، وعلاوة على ذلك ، أن يعرف شكل المفاعَلة بين الجسيمات لكي يكون من الممكن التوصيف الكامل لسلوك هذا النظام مستقبلاً . وهكذا ، في ميكانيك الكم أيضاً ، نتوقع من عملية القياس أن تُفضي بشيء ما عن حالة النظام بما يجعل استقراءات سلوكه المستقبلي ممكنةً . وفي حالة النظم كبيرة الحجم والتي يشكل الميكانيك الكلاسيكي توصيفاً مقبولاً لها يمكن للقياس من حيث المبدأ أن يجري بما يكفي من الدقة بحيث نستطيع تجاهل المفاعلة بين معدات القياس والنظام الخاضع للقياس . فالمرء يراقب النظام دون أن يُدخل عليه اضطراباً محسوساً . ومن الناحية الأخرى وبالنسبة للنظم دقيقة الحجم ، يستحيل عادةً من حيث المبدأ (وعلى الأقل ، ضمن حدود ما تسمح به معارفنا الحالية !)، إجراء قياسات لاتسفر في الوقت ذاته عن اضطراب النظام بشكل يكون ـ على العموم ـ غير قابل للتنبؤ . ويبدو من المعقول التوقع أن القياس الجاري على النظام سيكون على نحو يفضي بشيء ما عن الحالة الراهنة والمستقبلية لهذا النظام ، ولكن ليس بالضرورة عن ماضيه . وإذا تذكرنا أن النظام قد تعرض للاضطراب بسبب القياس ، يمكننا أن نميز حالة هذا النظام قبل قياس معين عن حالته بعد ذلك القياس فقط عندما يكون أثر القياس موصوفاً بشكل كامل ضمن نتيجة القياس ولكن اضطراب النظام الذي ينجم عن القياس يبقى على العموم غير قابل للاستقراء .

سنوضح هذه النقطة بمثال : إذا قيس زخم جسيم ما ، فان نتيجة القياس ليست بالضرورة أن تسمح باستنتاج محدد إزاء مقدار الزخم قبل القياس . ومن ناحية ثانية اذا كانت المفاعلة ستعدُّ قياساً يجب عليها أن تقول شيئاً ما عن النظام بعد

القياس . فالتكرار الفوري لقياس الزخم سيعطي القيمة نفسها .

إن الشكلانية التي استعرضناها سابقاً تلبي هذه الشروط العامة ولنأخذ نظاماً يجري توصيفه بدالة موجية تشكل تراكباً من الدالات المميزة للمؤثر Q :

$$\psi = \sum c_j \psi_j, \qquad Q\psi_i = q_j \psi_j \qquad (7-1)$$

يكون الملحوظ q في مثل هذا النظام غير معرف أو غير محدد ، اذ يمكن لقياس q ان يؤدي الى أية من القيم q_j التي يتحقق لأجلها الشرط $|c_j|^2 \neq 0$. واذا جرى قياس q ، فسيعطي قيمة خاصة من قيم q الممكنة ، ولنقل q_n . واذا افترضنا أن القيمة المميزة غير مفككة فمن الواضح أن الدالة الموجية يجب أن تصبح ψ_n بعد القياس أو أن تختلف عنها على الأكثر بمعامل جداء ثابت . لهذا ومن الواضح فوراً للعيان أن القياس قد أسفر في الحقيقة عن اضطراب حالة النظام بطريقة ذات مغزى مُغيراً الدالة الموجية من ψ الى ψ_n ومن ناحية أخرى يكون القياس قابلاً للتكرار بشكل فوري من حيث المبدأ و بنتيجة محددة تكمن في الحصول مرة أخرى على q_n وذلك لأن جميع c_j في نشر الدالة الموجية |(7-1) قد أصبحت الآن صفراً باستثناء أن $|c_n| = 1$ ان الشرط القاضي بأن يكون القياس قابلاً للتكرار الفوري هو ضروري عادة لأن Q ـ في الحالة العامة ـ لا يبادل مؤثر هاملتون ، مما يجعل ψ تتغير عن ψ_n بمرور الزمن .

لقد رأينا سابقاً ، أنه بالرغم من كون قياسين اثنين غير قابلين للجمع على العموم فان بعض القياسات المعينة قابلة للجمع مما يعني امكان اجرائها سوية في الوقت نفسه . وتنتج قابلية القياسات للجمع بشكل واضح عندما تكون الدالة الموجية هي دالة مميزة مشتركة لمؤثرين اثنين في آن واحد وهذا يحدث كما بيّنا سابقاً حين يكون المؤثران متبادلين .

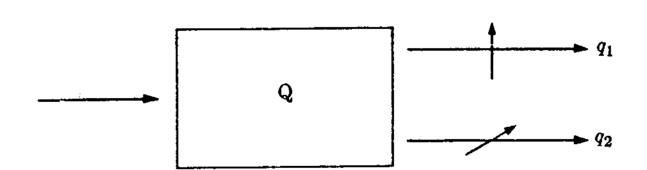
2-7 استقطاب الفوتون

من الصعب مناقشة المسائل الفيزيائية المرافقة لمفهوم القياس في ميكانيك الكم بالارتباط مع طرازات القياسات التي وصفناها سابقاً ، وذلك نظراً للعدد الكبير للنتائج التي يمكن أن تسفر عنها قياسات كهذه . لهذا السبب ، سوف نستخدم طرازاً بسيطاً من القياسات لمناقشة صنوف المسائل الفيزيائية التي تبرز بالترابط مع قياس كمية

فيزيائية . ولنأخذ فوتوناً ما والمسائل المتصلة بقياس استقطابه . وبخاصةٍ سنأخذ نوعين من قياس الاستقطاب يمكن اجراؤهما على الفوتون . ذلك أن « الاستقطاب المستوي » للفوتون يمكن أن يُقاس لمعرفة ما اذا كان الاستقطاب المستوي شاقولياً أو أفقياً . وسنسمي هذا الطراز من القياسات قياسات Q ، والوسيلة المستخدمة لإجرائها مبيَّنة بطريقة تخطيطية في الشكل (7−1).

لنتخيل في هذا الشكل أن الصندوق يحتوي على بلورة ذات انكسار مزدوج مثل الكالسيت ، ويدخل الفوتون الصندوق من اليسار ويغادره من الممرين الضوئيين الممكنين كليهما ، واللذين نرمز اليهما بـ q_1 و q_2 ويخصان على التوافق الاستقطابين المستويين الشاقولي والأفقي .

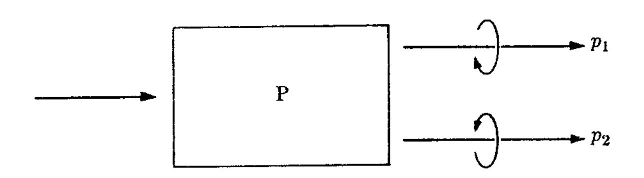
يمكن على نحو مشابه تحديد ما اذا كان الفوتون مُسستَقطَباً دائرياً باتجاه دوران عقارب الساعة أو بعكسه . والوسيلة المستخدمة لاجراء هذا القياس والذي سنرمز له بـ P ، مبينة في الشكل (7−2) ويمكن ـ بطريقة مماثلة ـ تخيُّلها على شكل صندوق يحتوي بلورة بالاضافة الى اثنتين من صفائح ربع الموجة ، احداهما قبل البلورة والأخرى بعدها ، موجهتين بحيث تكون الفوتونات ، التي تغادر عبر الممر العلوي مُستقطَبة دائرياً كما هو مبين ، والفوتونات التي تغادر عبر الممر السفلي مُستقطَبة دائرياً بالاتجاه المعاكس .



الشكل (7−1) . تمثيل تخطيطي للجهاز الذي يقيس فيها اذا كان الاستقطاب المستوي للفوتون شاقولياً أو أفقياً . يتوقف الممر ، الذي يتخذه الفوتون المغادر للجهاز Q . على حالة استقطابه المستوي .

كما هو مبين أيضاًورمزنا لهذين الممرين بكلٍ من P_1 و P_2 على الترتيب..

لنلاحظ أن القياسين Q وP يشابهان بطريقة معينة قياسَي زخم الجسيم وموضعه ، فهذان القياسان غير قابلين للجمع ، وهما ، بمعنى ما ، قياسان متتامَّان .



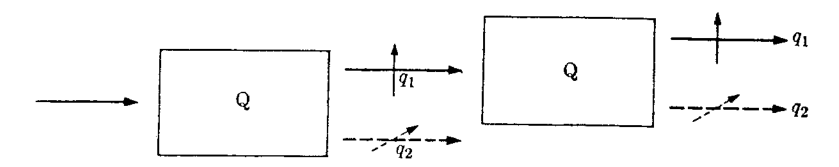
الشكل 7-2 . تمثيل تخطيطي للجهاز الذي يقيس فيما اذا كان الاستقطاب الدائري للفوتون باتجاه دوران عقارب الساعة أو عكسه . يتوقف الممر ، الذي يتخذه الفوتون المغادر للجهاز P على حالة استقطابه الدائري .

إنه لغريب جداً بالفعل لو كان بوسعنا القول إن الفوتون كان مستقطَباً في المستوى الشاقولي وفي الوقت نفسه كان مستقطَباً دائرياً باتجاه اليمين . ولكن المرء لا ينظر بالقدر نفسه من الاستغراب الى امكان أن يكون الالكترون في حالة محددة الزخم ومحددة الموضع في آن واحد . إن الفارق في « الغرابة » الواضحة يمكن أن نعزوه الى رواسب التصورات الكلاسيكية القائمة على أساس الملاحظات اليومية .

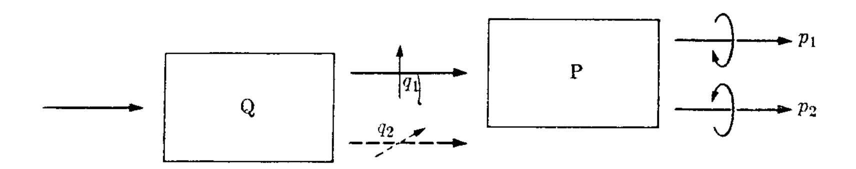
يستجيب القياسان Q و P لشرط قابلية التكرار . فكما هو مبينٌ في الشكل (7-3) ، اذا كان الفوتون ، الذي يدخل الجهاز Qيغادره عبر الممر q_1 ، ويمكن له ، بالتالي ، أن يعبر خلال جهاز قياس من الطراز نفسه لكي يغادر من جديد عبر القنال q_1 . ويمكن الحصول على النتيجة نفسها في حالة القياس P .

إن قياساً من هذا الطراز يشكل ليس فقط تحديداً لاستقطاب الجسيم بل وكذلك مفاعلة مع الجسيم بطريقة تؤثر في الاستقطاب وهو ما يمكن رؤيته بالنظر الى الشكل (7-4) ففي هذا الشكل يدخل الفوتون من اليسار ويمكنه أن يكون في حالة ذات استقطاب محدد أو لا يكون ولكن الاستقطاب قد تحدد بوساطة القياس على أنه q_1 (فالفوتون يغادر الصندوق Q عبر هذا القنال) . وفي هذه الحالة ، يتبع القياس P إثر القياس Q . وإننا نجد ، وبعد اجراء عدد كبير من القياسات من هذا الطراز على فوتونات مماثلة أن المرء لايستطيع التنبؤ عبر أي واحد من القنالين P سوف يظهر الفوتون . فمن المرجح ظهوره عبر القنالين P_1 و P_2 على نحوٍ متساوٍ . وبكلمات أخرى ، فإن الاستقطاب P غير قابل للاستقراء بأي حال من الأحوال اذا ما أجري قبله

القياس Q . وهذا الوضع مشابه لمسألة قياس زخم الالكترون بعد أن أجري قياس لموضعه .



الشكل 7-3 تمثيل تخطيطي للقياس المكرر Q لتحديد حالة الاستقطاب المستوي للفوتون

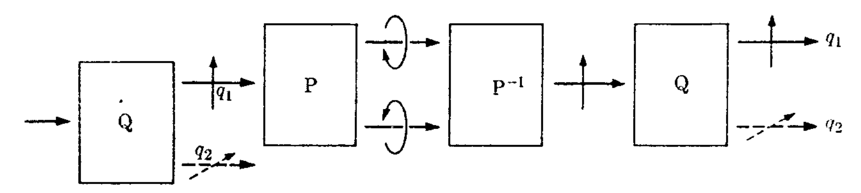


الشكل 7-4 تمثيل تخطيطي لقياس حالة الاستقطاب الدائري P للفوتون بعد إجراء القياس Q لتحديد حالة الاستقطاب المستوي .

الآن وبعد تحديد الاستقطاب P لفوتون معين في حالة p_2 يتم اجراء القياس Q من جديد . وهذه المرة نجد أنه من المرجح اكتشاف الفوتون عبر القنالين q_1 أو q_2 على نحو متساوٍ . وبكلام آخر ، فإن قياس الاستقطاب p الذي أجري كخطوة انتقالية قد أتلف كل المعلومات التي كانت لدينا عن الاستقطاب Q إتلافاً كاملاً . وهذا أيضاً مماثل لحالة زخم الجسيم وموضعه . ويمكن تحديد زخم الجسيم بدقة ولكن اذا ما قيس زخمه بعد ذلك فإن القياس التالي لموضعه ليس من المرجح أن يعطي النتيجة نفسها التي كانت عند القياس الأول للموضع .

لقد تم توصيف الأدوات الممثّلة في الشكلين (7-1) و (7-2) بمصطلحات الأجهزة التي تقيس استقطاب الفوتون ، وهذا ـ اذا تكلمنا بصرامة ـ غير دقيق تماماً . فهنالك عنصر آخر لا بد منه لتحديد استقطاب الفوتون ، ولكي نبين ما هو ، سننظر في الشكل (7-5) ويتضمن الجهاز المتمثل هنا عنصراً آخر لم نلتق به سابقاً ، ولنرمز له بـ P^{-1} . ويمكن تصور هذا العنصر على أنه صندوق آخر يشبه P ولكنه يشتغل في

الاتجاه العكسي ، ويمتاز بصفة أنه اذا أُخذ Pبالاشتراك مع P^{-1} فإن ذلك لايؤثر في استقطاب الضوء بالمرة . وإنه من الواضح لأي شخص يمتلك خبرة في مسائل البصريات أن يعرف كيف يمكن الجمع بين صندوق الاستقطاب P والصندوق الآخر المماثل بقصد الحصول على جهاز لا يؤثر في استقطاب الضوء . وبالتالي فإن هذا الاجتماع بين P و P^{-1} يتم بحيث يمرر الضوء تمريراً صرفاً دون النظر الى استقطابه . وفي الشكل (7–5) يمكن عدّ الصندوق الأول Q يقيس حالة الاستقطاب على أنها q_1 ، بينما الصندوقان التاليان P و P^{-1} ، يمرران الفوتون الى الصندوق Q الثاني بحالة الاستقطاب نفسها بحيث يتم الحصول على النتيجة q_1ثانيةً .



الشكل 7–5 تمثيل تخطيطي لفعل الجهاز P الذي يتلوه جهاز معاكس P^{-1} ، حينما يتم حصر الجهازين p و p^{-1} بين قياسين Qلتحديد حالة الاستقطاب المستوي للفوتون .

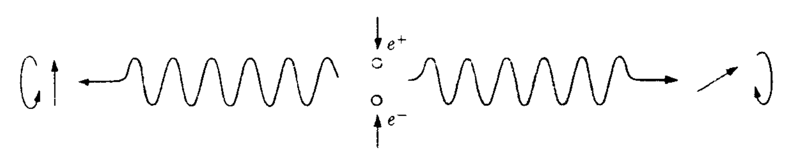
سنكرر بطريقة أخرى هنا : بالرغم من أن قياس الاستقطاب Pفي الشكل (7–4)قد خرَّب بشكل كامل الاستقطاب السابق Q جاعلاً من المستحيل استقراء النتيجة الحاصلة عن القياس Q التالي ، فإن الإضطراب الذي يتعرض له الاستقطاب من جراء فعل الصندوق P في الشكل (7–5) قابل للالغاء : إذا قُرن الصندوق Pبصندوق آخر يعدل أثره ، فإن هذا الاجتماع يمكن أن يقوم بحيث يبقي على الاستقطاب Q دون مساس . ومن جهة أخرى يجب الاشارة الى أن الصندوق P الأول (الشكل (7–5)) لم يكن ـ في هذه الحالة المحددةـ يقيس استقطاب الفوتون فعلياً ، اذ انه لم يكن يجري تحديد القنال (p_1 أم p_2) الذي يسلكه الفوتون لمغادرة الصندوق P . فمن المستحيل التنبؤ عبر أي واحد من الممرين الممكنين سيغادر الفوتون الصندوق P . وفي الواقع يمكن تبيان أنه اذا أفاد التحديد (من خلال المفاعلة مع عدّاد فوتونات !) بأن الفوتون في الممر p_1ـ مثلاً ـ فإنه يكون بذلك قد تعرض

للاضطراب أثناء المفاعلة بحيث لم يعد صحيحاً التأكيد على أن القياس النهائي Q سوف يسفر تحديداً عن النتيجة q_1 . فالقياس النهائي Q يؤدي الى النتيجتين q_1 و q_2 باحتمالية متساوية .

إننا نرى من سلسلة التجارب هذه أن قياس الاستقطاب المتمثّل بالشكل (7—1) يشتمل على عناصر أكثر من تلك ، التي يتضمنها مجرد شطر الحزمة الضوئية بين الممرين q_1 و q_2 . فبالنسبة للفوتون المعين ، يجب أن يتم تحديد ممره قبل تلك اللحظة ، التي يمكن فيها عدّ القياس مُنجَزاً . واذا تم إغفال هذا التحديد ، فإن الاضطراب الذي يطرأ على الاستقطاب كنتيجة يمكن ابطال مفعوله . وبالتالي يجب القول إن قياس الاستقطاب Q قد تم فقط إذا وجد هناك مكشاف في كل من الممرين q_1 و q_2 ليشير إلى الاستقطاب Q لدى الفوتون .

هناك عدد من سمات المفارقة يرتبط بالأمثلة الواردة أعلاه . لهذا سننظر الآن في مفارقة أخرى تتعلق بمفهوم القياس ، وهي ـ في جوانب كثيرة ـ الأصعب بين سائر المفارقات الأخرى من حيث إمكان مواءمتها مع تصورنا العادي عن العالم الفيزيائي . ولنأخذ الفوتونين الناتجين عن الإفناء المتبادل بين الالكترون والبوزيترون ، كما هو مبين في الشكل (7—6). ففي هذا المثال الجزئي يُفترَض أن فناء الالكترون والبوزيترون يتم في حالة تتصف بأن الزخم الزاوي الإجمالي للنظام يساوي الصفر . وبالتالي ، عندما يغادر الفوتونان نقطة الإفناء متحركين في اتجاهين متعاكسين ، يجب عليهما نقل زخم زاوي مساو بمجمله الصفر : لا يمكن وجود زخم زاوي صرف حول المحور الذي يتجه باتجاه انتشار الفوتونين . لكن الفوتون في حالة الاستقطاب الدائري يحمل زخماً زاويّاً وبالتالي فاذا كان أحد الفوتونين مستقطباً دائرياً نحو اليسار يجب أن يكون الآخر مستقطباً دائرياً نحو اليمين بحيث يكون الزخم الزاوي الإجمالي حول المحور مساوياً الصفر . عندئذٍ يمكن القول إن قياس الاستقطاب الدائري الذي يجري على أحد الفوتونين يمكّننا من التنبؤ بنتيجة القياس التالي الذي يجري للفوتون الآخر بقصد تحديد الاستقطاب الدائري لديه . وعلى صعيد آخر معروف من النظرية ومن التجربة كلتيهما ، أنه اذا تحدد أحد الفوتونين في حالة الاستقطاب المستوي ، ولنقل بالاتجاه الشاقولي مثلاً فإن الفوتون الآخر سيكون استقطابه المستوي في الاتجاه الأفقي . إن الجدير بالانتباه هنا هو كون القياس الذي يُجرى على أحد الفوتونين لتحديد استقطابه المستوي ، يمكننا من التنبؤ بأن استقطاب الفوتون الآخر أيضاً مستوٍ ومن ثم تحديد

اتجاه هذا الاستقطاب . ومن الناحية الأخرى يمكننا قياس الاستقطاب الدائري لدى الفوتون الأول من التنبؤ بالاستقطاب الدائري لدى الفوتون الآخر وباتجاه هذا الاستقطاب .



الشكل 7–6 فناء الزوج « الكترون ـ بوزيترون » في حالة زخم زاوي يساوي الصفر ، وانبثاق شعاعَيْ كاما (فوتونين طاقتهما عالية) متضادين بالاتجاه ومتعاكسين من حيث الاستقطاب .

بما آن قياس الاستقطاب على الفوتون الأول يجري بعد ولادة الفوتونين بوقت طويل فمن الصعب جداً أن نتصور كيف يمكن عدُّ هذا القياس يؤثر في استقطاب الفوتون الآخر . ولكن الافتراض البديل الواضح يخلق تشويشاً بالقدر نفسه : فأن يكون الفوتون في حالة استقطاب دائري ومستوٍ بآن واحد يعني تشويه مفاهيمنا الاعتيادية عن الاستقطاب . ومن الواضح هنا أننا نواجه موقفاً لايقبل التفسير بلغة النموذج الكلاسيكي . ففي أي نموذج كلاسيكي يكون توصيف النظام كاملاً عندما يتم توصيف استقطابي الفوتونات (الدائري والمستوي) كلاً على حدة . ولكنه يتبين بدلاً من ذلك أن الفوتونات مترابطة في سلوكها . فاذا تم « حشر » فوتون في حالة الاستقطاب الدائري لا بد للآخر أن يتبعه . وإن الفوتونين يشكلان نظاماً حركياً (دينمياً) منفرداً ، وأية معلومات حول النظام يتم الحصول عليها هي معلومات حول الفوتونين كليهما . وأية مفاعلة يتعرض لها أحد الفوتونين هي مفاعلة مع النظام وتؤثر في حالة النظام بمجملها . وإن المفارقة المشار اليها هنا مشابهة لتلك المفارقة التي كان اينشتاين وبودولسكي و روزن أول من ناقشها(*) ولكن السلوك التناقضي في المثال الوارد أعلاه قد أُخِذ على نحو أكثر رهافة .

(*) انظر :

(*)A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, "Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?" *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).

3-7 خلاصة .

تمت مناقشة موجزة لعملية القياس وتبيَّن من خلالها أن أي قياس يجري على النظام الفيزيائي له وظيفة مزدوجة فأولاً ، وبشكل رئيس يُدخل القياس اضطراباً الى النظام ويؤول به الى حالة أخرى بحيث أن التكرار الفوري للقياس لا يؤدي الى اضطراب إضافي في النظام . أما ثانياً ، فإن القياس يعطي للمراقب معلومات حول الحالة النهائية للنظام وتكون هذه المعلومات على شكل أرقام تعبر عن قيمة الكمية الخاضعة للقياس ولكنها أيضاً تصف حالة النظام . لقد استخدمنا قياس الاستقطاب لدى الفوتون كمثال لتوضيح الأفكار الفيزيائية ووجدنا أن المفاعلة غير العكيسة بين جهاز القياس والنظام يجب أن تحدث قبل إنجاز القياس الحقيقي . كما ناقشنا استقطاب الفوتونين الناجمين عن الإفناء المتبادل بين الكترون و بوزيترون بمثابة مثال ختامي على السلوك التناقضي الذي يبرز أثناء بعض القياسات .

الفصل الثامن

مبدأ التوافق

8-1علاقة ميكانيك الكم بالميكانيك الكلاسيكي .

يتم في الميكانيك الكلاسيكي تحديد موضع الجسيم وزخمه بدقة بينما تحدد معادلات الحركة القيم المستقبلية للموضع والزخم بوصفهما دالتين تابعتين للزمن . أما في ميكانيك الكم ، فقد رأينا أنه من المستحيل أن نحدد موضع الجسيم وزخمه في آن واحد وبدقة صارمة ضمن حدود ما نعرفه من عمليات القياس الفيزيائي . وهذا ما يثير مسألة هامة ترتبط بالعلاقة بين الميكانيك الكلاسيكي وميكانيك الكم . إن النطاق الواسع للظاهرات الفيزيائية التي يمكن للنظرية الكلاسيكية معالجتها يشير الى أنها نظرية فيزيائية فاعلة . وبطريقة ما يجب على ميكانيك الكم أن يؤدي ـ بالنسبة للنظم « الكلاسيكية » ذات الأحجام الكبيرة ـ الى الاستقراءات نفسها التي يسفر عنها الميكانيك الكلاسيكي . وإن هذا التوافق ، الذي نطالب بوجوده بين ميكانيك الكم والميكانيك الكلاسيكي في دنيا الأجسام الكبيرة هو ، في الواقع ، على قدر من الأهمية بحيث أنه أطلقت عليه تسمية : **مبدأ التوافق**(*) . إن المفتاح الى تحديد حالة الجسيم الضرورية ـ لأجل عدّه كلاسيكياً ـ نجده عند استنطاق الفرضيات الواردة في الفصل السادس وعلى وجه التحديد الفرضية رقم 7 . ويبين مثل هذا الاستنطاق أن جانباً ذا أهمية قصوى من جوانب نظرية الكم يكمن في وجود قياسات غير قابلة للجمع ، وهو ما يتم التعبير عنه بعدم المبادلة بين المؤثرات المرافقة لملحوظات فيزيائية معينة . وتبين الفرضية 7 أن القياس الكمي لهذا الفارق يُعطى بمقدار الثابت $\hbar$ ، وهو ، كما رأينا سابقاً ، صغير جداً 1.054×10^{-27} ارغ/ ثا . لهذا يمكن عدّ النظام « كلاسيكياً » عندما تكون المعالم ، التي تصفه وتملك مقياس الفعل نفسه الذي يميز النظام ذات مقدار أكبر بكثير مقارنةً مع $\hbar$. وتلزم النظرية الكمية فعلياً ـ عادةً ـ على

(*) انظر :

N. Bohr, "The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic Teory," *Nature* 121, 580 (1928).

المستوى دون المجهري فقط . أما الاستثناءات فسوف يشار إليها خصيصاً .

2-8 الانتقال من ميكانيك الكم الى الميكانيك الكلاسيكي .

لقد بينت المناقشة الواردة آنفاً ما هي الشروط التي يجب على المرء أن يتوقع ضمنها فعالية الأفكار الكلاسيكية ، ومتى يجب عليه أن يتوقع الحاجة الى التصورات الكماتية . لكنه لم يجر تبيان الكيفية التي يمكن تطبيق النظرية الكمية (بكل ما يميزها من تقطّعات غريبة وجوانب المفارقة) على الفيزياء الحجمية ليسفر ذلك عن توصيف مكافىء لميكانيك الكم . وسندرس في هذه الفقرة كيفية هذا الدمج بين النظريتين .

لقد رأينا أنه من المستحيل التحديد المتزامن لموضع الجسيم وزخمه بدقة صارمة ، ولكن يمكن قياس كليهما في آن واحد بدرجة محدودة من الدقة . وسوف تناقش لاحقاً في هذا الفصل الصياغة الكماتية لكيفية تحديد الدقة بالضبط .

اذا كان موضع الجسيم وزخمه يقاسان بدقة محدودة فان الدالة الموجية الناتجة ستكون على شكل رزيمة موجية يتموضع فيها الجسيم الى مدى ما في منطقة معينة . ويتمركز زخم الجسيم كذلك داخل نطاق معين في الفراغ الزخمي ولكي يسفر ميكانيك الكم عن نتائج صالحة عند النهاية الكلاسيكية فمن الضروري أن يمكن توصيف الحركة التي تمارسها رزيمة موجية كهذه بلغة المعادلات الكلاسيكية للحركة .

ولكي نرى كيف يجري ذلك ، يجب أن نختار الكميات التي تشكل قرائن للموضع والزخم بتعريفهما الكلاسيكي . وكما وجدنا سابقاً تبدو القيمتان المتوقعتان لموضع وزخم الجسيم المرفق بالرزيمة الموجية اختياراً موفقاً . وفي الواقع تمثل القيمة المتوقعة مركز ثقل الرزيمة الموجية ، وبالتالي ، فإننا سوف نعرّف موضع الرزيمة الموجية وزخمها الزاوي ، . . . الخ ، على أنها القيم المتوقعة المعنية .

يمكن ، وبالاستفادة من الفرضية 5 في الفصل السادس بالنسبة للقيمة المتوسطة لإحداثي موضع الجسيم x الحصول على مقدار التغير في هذه الكمية ، وذلك كما في المعادلة التالية :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle x\rangle &= \frac{d}{dt}\int \bar{\psi} x \psi \, dr \\ &= \int \left[\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} x\psi + \bar{\psi} x \frac{\partial \psi}{\partial t}\right] dr \end{aligned} \qquad (8-1)$$

والتي يمكن عدّها بمثابة سرعة الرزيمة الموجية .

من الضروري أن نكون حذرين فيما يتعلق بمدلول معادلة من نوع (1−8)؛ فالقيمة المتوقعة x تمثل متوسطاً تجمعيّاً لنتائج قياس منفرد يجرى على x في كل واحد من عناصر التجمع . ويشكل المشتق في المعادلة (1−8) المقدار الزمني لتغيُّر ذلك المتوسط . وهذا لا يعني فيزيائياً ما يعنيه المقدار $\langle p_x/m \rangle$ نفسه ، والذي يشكل متوسطاً تجمعيّاً لنتائج قياس الزخم (منسوباً الى كتلة الجسيم). ولا يتطابق هذا أيضاً مع المتوسط التجمعي لقياسات السرعة . ولا تظهر في الميكانيك الكمي غير النسبي المؤثرات الخاصة بقياس السرعة ، فبغية إجراء قياس دقيق لسرعة جسيم ما يجب تحديد موضعه وإجراء قياس آخر للموضع في وقت لاحق . ويجعل القياس الأول للموضع الزخم غير محدد مما يجعل ـ بدوره ـ تعريف السرعة ومن خلال قياسين ناجحين لموضع الجسيم عملاً لا معنى له .

تساوي القيمة المتوقعة $\langle dQ/dt \rangle$ الصفر ، إلا إذا كان المؤثر Qدالة صريحة (ناطقة) للزمن . لذلك تتحقق عادةً العلاقة التالية :

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle \neq \left\langle \frac{dQ}{dt} \right\rangle \qquad (8-2)$$

أما في المعادلة (1−8) ، فثمة افتراض بأن x ليست دالة صريحة لمتغير الزمن t . وبتعويض معادلة شرودينغر

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (8-3)$$

ومترافقها العقدي في المعادلة (1−8) نجد أن :

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, x] \rangle. \qquad (8-4)$$

ويكون الطرف الأيمن في هذه المعادلة هو $i/\hbar$ مضروباً بالقيمة المتوقعة لمبدِّل المؤثرين H و X .

ولكي نمنح هذه النتيجة صيغة أكثر ملاءمة لمقارنتها مع المعادلة الكلاسيكية ، علينا أن نحسب عدة من مبدِّلات . ويساوي مبدِّل المؤثرين الموافقين لمركّبة الزخم p_x وإحداثي الموضع x المقدار التالي :

$$[P_x, x] = -i\hbar \qquad (8-5)$$

وهذا ما يمكن رؤيته من المعادلة (59−5) والفرضية 7 في الفصل السادس . وهكذا

فإن :

$$[P_x, y] = 0 \qquad (8-6)$$

ومن المعادلة (8-5) ينتج أن :

$$P_x^2 x - P_x x P_x = -i\hbar P_x \qquad (8-7)$$

وأن :

$$P_x x P_x - x P_x^2 = -i\hbar P_x \qquad (8-8)$$

ويكون مجموع المعادلتين الأخيرتين ما يلي :

$$P_x^2 x - x P_x^2 = [P_x^2, x] = -2i\hbar P_x \qquad (8-9)$$

وهذا ما يمكن تعميمه بسهولة ليصبح كالآتي :

$$[P_x^n, x] = -ni\hbar P_x^{n-1} \qquad (8-10)$$

إن الحصول على هذه النتيجةممكن أيضاً من خلال التقدير المباشر لأقواس بواسون وبوساطة الفرضية 7 من الفصل السادس . فبالنسبة للنظام الذي يتميز بمؤثر هاملتون التالي :

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + V(r) \qquad (8-11)$$

وبالاستفادة من المعادلات (8-4) و (8-6) و (8-9) ، يمكن الحصول بسهولة على معادلة تعطي سرعة الرزيمة الموجية من خلال زخم هذه الرزيمة :

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle \qquad (8-12)$$

ويمكن على نحو مماثل استخلاص مقدار التغير في زخم الرزيمة الموجية من خلال القوة المتوسطة المؤثرة فيها :

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \qquad (8-13)$$

وهذا هو المعادل في ميكانيك الكم لقانون نيوتن الثاني للحركة ، وهو يربط مقدار التغير في زخم الرزيمة الموجية مع القوة المتوسطة التي تؤثر في الجسيم المرفق بالرزيمة .

يمكن تعميم الحجج التي تقود الى المعادلتين (8-12) و (8-13) بسهولة

لتعطي مقدار التغير مع الزمن في القيمة المتوسطة لأية كمية فيزيائية منسوبة الى الجسيمات المتعلقة بالرزيمة الموجية . وليكن المؤثر Q موافقاً للملحوظ فيزيائي عام . عندئذٍ يعطى مقدار التغير الزمني في القيمة المتوقعة لـ Q ـ من أجل الجسيمات المرفقة بالرزيمة الموجية ـ من خلال المعادلة التالية :

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, Q]\rangle + \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t}\right\rangle \qquad (8-14)$$

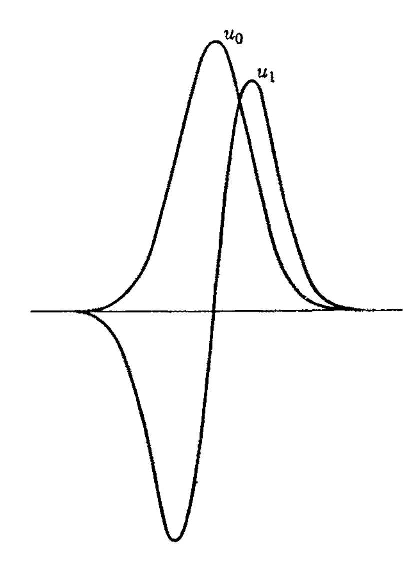
و بالطبع تكون هذه المعادلة على علاقة وثيقة جداً بالتعبير الكلاسيكي الخاص بمعادلات الحركة التي تستخدم أقواس بواسون وتبين مقارنة المعادلة السابقة مع المعادلة (5-55) التوافق التام إذا ما تمت الاستعاضة عن الملحوظ الكلاسيكي بالقيمة المتوقعة الكماتية واذا استبدلت أقواس بواسون في المعادلة (5-55) بـ $-i/\hbar$ مضروباً بأقواس المبدِّل الكماتي المعني وهذا ما يتفق مع الفرضية 7 من الفصل السادس . وإنه لمثال على الترابط الشكلي الوثيق بين الصياغتين الكلاسيكية والكماتية للميكانيك ، كما ذكرنا في الفصل السادس ، وبالنسبة للفرضية ذاتها . وفي الواقع ، يتعين أن تتوافر المتطلبات التي يفترضها مبدأ التوافق اذا كنا نريد بناء نظرية فعالة . وكمثال بدهي على تطبيقات المعادلة (8-14) يجب أن نلاحظ أن مقدار التغير في القيمة المتوقعة لطاقة الجسيمات المرفقة بالرزيمة الموجية يساوي الصفر في حالة القوى المحافظة حيث ($\partial H/\partial t = 0$) :

$$\frac{d}{dt}\langle H\rangle = 0 \qquad (8-15)$$

وهذه هي الصيغة التي يتخذها حفظ الطاقة عند النهاية الكلاسيكية للنظرية حيث يتم تطبيق ميكانيك الكم على رزيمة موجية تمثل جسيماً يخضع للتوصيف الكلاسيكي .

ويمكن الحصول على صورة أعمق فيزيائياً عن الطريقة التي يمكن بها للرزيمة الموجية أن تسلك سلوك الجسيم الكلاسيكي ، وذلك من خلال دراسة المتذبذب التوافقي البسيط ذي البعد الواحد . ولقد رأينا ، — وخلال المناقشة السابقة حول هذا المتذبذب أن التوصيف الكماتي لحركة الجسيم قد يختلف كثيراً عن مثيله الكلاسيكي (راجع الفصل الثالث). ففي الحالات ذات الطاقة المحددة ، تكون احتمالية العثور على الجسيم في موضع معين مستقلة عن الزمن . ولكن ، ومن الناحية

الكلاسيكية ، يتذبذب الجسيم في المتذبذب التوافقي البسيط بطريقة تجعل احتمالية وجوده ـ وضمن عنصر حجمي معين في نقطة محددة ـ تختلف تماماً بين لحظة و أخرى . وهذه الاحتمالية في الواقع إما أن تساوي الصفر أو تساوي الواحد . وعلى النحو نفسه يتغير زخم المتذبذب التوافقي البسيط مع الزمن باستمرار . ويتم توصيف الزخم وفقاً لشكلانية ميكانيك الكم بحيث أنه يوجد ولكل حالة من حالات الطاقة المحددة ، توزيع للزخم يوافق مختلف الأمواج المستوية التي يشملها نشر الدالة الموجية . وتتوافق موجة مستوية مع حالة محددة من حالات الزخم ، بينما يفترض الطابع الثابت للحالة الثبات في مقدار احتمالية الحصول على زخم محدد والسؤال الذي يبرز عندئذ هو : كيف يمكن القول إن الشكلانية الكلاسيكية هي مكافىء لـ (أو حالة خاصة من) شكلانية ميكانيك الكم ؟



الشكل 8–1 الدالتان الموجيتان u_0 و u_1 لحالتي الطاقة الأدنى بالنسبة للمتذبذب التوافقي البسيط .

تبرز العلاقة بين التوصيف الكلاسيكي والتوصيف الكماتي كما سبق ورأينا اذا نظرنا في حركة الرزيمة الموجية . فبالنسبة لحالة المتذبذب التوافقي البسيط سنأخذ حلاً

من حلول معادلة شرودينغر لا يمثل حالة طاقة محددة بل تراكباً لعدة من حالات طاقية والمثال الأبسط بين كل الأمثلة التي يمكن دراستها هو التراكب بين حالتين طاقيتين فقط ولتكونا حالة الطاقة الدنيا والحالة الطاقية الأولى والدالتان الموجيتان لهاتين الحالتين مرسومتان في الشكل (8−1) . وتضرب التبعية الفراغية للدالتين الموجيتين بالتبعية الزمنية لهما ثم يجمع الجداءان ليسفر عن الدالة الموجية لتراكب حالتي الطاقة قيد البحث :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\exp\left(-i\,\frac{E_0}{\hbar}\,t\right)u_0 + \exp\left(-i\,\frac{E_1}{\hbar}\,t\right)u_1\right] \qquad (8-16)$$

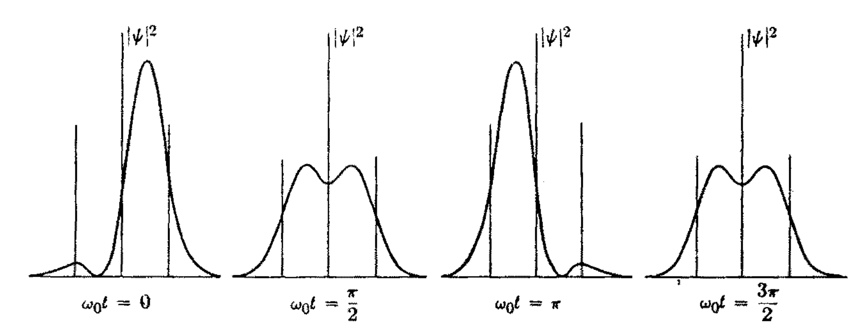
ويبين الشكل (8−2) المربع المطلق لهذه الدالة الموجية ، و ذلك وفقاً لعدة من أزمنة مختلفة .

يمكن أن نرى من الشكل المذكور أن الدالة الموجية تشبه جداً،ومن حيث شكلها ، جسيماً يتذبذب مع المتذبذب التوافقي البسيط ويجب أن نلاحظ وعلى سبيل التخصيص ، أن تردد الذبذبة هو التردد التوافقي البسيط تماماً والذي يلاحظ في حالة التذبذب الكلاسيكي الموافق .

لهذا ، يبدو من المعقول أنه لو قمنا بمراكبة عدد كبير من حالات الطاقة ، لكان بمقدورنا أن نحصل على الرزيمة الموجية الغاوسية بشكل وثيق أكثر فأكثر ؛ تلك الرزيمة التي تتذبذب بطريقة مطابقة جداً لحركة الجسيم الكلاسيكي وانطلاقاً من وجهة النظر هذه يبدو التوصيف الكلاسيكي لحركة الجسيم أنه يضمن تعريف موضع الجسيم وزخمه بدقة محدودة ولكن ليس بدقة صارمة .

يتم توصيف حالة النظام بوساطة رزيمة موجية يمثّل موضعُها بدقة تزيد أو تنقص موضع الجسيم وتخضع للقوانين الكلاسيكية ومن الهام أن الطاقة ليست محددة بشكل كامل لأنه اذا كان النظام في حالة طاقة محددة لن يكون بمقدور الدالة الموجية أن تصف الحركة التذبذبية

يمكن رؤية التوافق بين التوصيفين الكلاسيكي والكماتي للمتذبذب التوافقي البسيط من زاوية أخرى أيضاً ولنأخذ ، من الناحية الكلاسيكية ، الحالة التي تكون طاقة المتذبذب فيها محددة ولكن لا شيء معلوم عن موضع الجسيم وزخمه . وهذا يعني أن التوصيف الكلاسيكي غير كامل ، اذ إن الشروط الأولية المتعلقة بالموضع وبالزخم



الشكل 8—2 الدالة الموجية الناجمة عن التراكب وفقاً للمعادلة (8—16) والمكونة من مركبتين متساويتي السعة وهما الدالتان المرسومتان في الشكل (8—1) وتبدو الدالة الموجية أربع مرات ، كل منها يوافق تزايداً متساوياً في الأطوار النسبية . لاحظ أن التشابه القوي مع السلوك التذبذبي الكلاسيكي للمتذبذب التوافقي البسيط واضح حتى في حالة التراكب البسيط هذه . ولقد أشير الى الحدود الكلاسيكية للحركة بخطوط شاقولية مع الافتراض بأن الطاقة E تساوي $E = \langle H \rangle = \hbar\omega$.

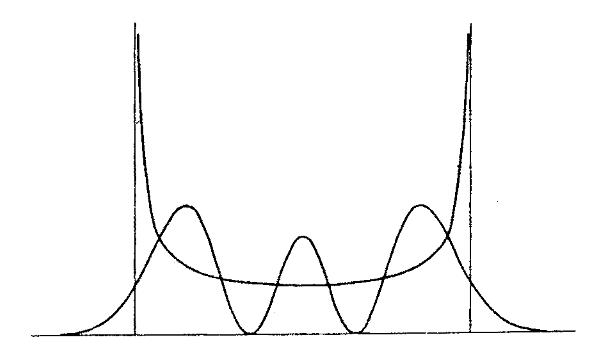
(بتوجُّه الزخم !) غير معروفة . ولكن بامكان المرء ، عندئذٍ ، أن يطرح أسئلة حول السلوك المتوقع كلاسيكياً لهذا المتذبذب ، بما في ذلك حول « كثافة احتمالية » العثور على الجسيم في أية نقطة من مساره الكلاسيكي . وإن احتمالية العثور على الجسيم في نقطة معينة من مساره تتناسب ، في النظرية الكلاسيكية عكساً مع سرعته في تلك النقطة ، لتصبح لا نهائية في نقطتي انعطاف الحركة ، حيث السرعة تساوي الصفر .

كثافة الاحتمالية الكلاسيكية بالنسبة للمتذبذب هي :

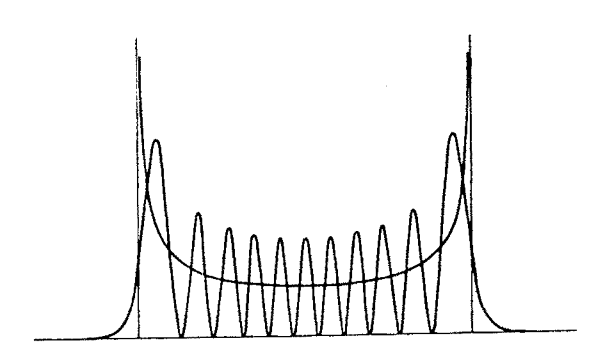
$$P(x)\,dx = \frac{1}{\pi}\,\frac{dx}{[(2E/k) - x^2]^{1/2}} \qquad (8-17)$$

حيث : E – طاقة التذبذب و k – ثابت النبض . وهذا التوزيع مبيّن بالرسم في الشكلين (8—3) و (8—4) الى جانب توزيعين لكثافة الاحتمالية الكماتية يوافقان عددين كميين ، أحدهما أدنى ($n = 2$) والآخر أعلى ($n = 10$) ، لكن المقاييس الأفقية في الشكلين معدَّلة بحيث يتطابق الحدان الكلاسيكيان لدورة الجسيم . ومع أن توزيع الاحتمالية في حالة $n=2$ مختلف جداً عن التوزيع الكلاسيكي ، نجده في حالة $n = 10$ شبيهاً جداً بالحالة الكلاسيكية دون النظر الى طابع التذبذب الكماتي في

مساره . ويجب أن نذكر هنا بأن حالة العدد الكمي n = 10 تكاد تقريباً توافق حالة الحركة متناهية الصغر ، لأنه اذا كان التردد هو دورة واحدة في الثانية ، فإن الطاقة تساوي فقط نحو 7×10^{-26}erg . وبالنسبة للحركات الحقيقية تصبح المسافة الفاصلة بين العقد الكماتية في توزيع الاحتمالية أصغر بكثير من أن يمكن كشفها في قياس عملي وعندئذٍ يكون الهام فقط هو التوزيع الوسطي ضمن مدى صغير من محور x . ولكن هذا التوزيع الوسطي بالنسبة للحركات الحجمية غير قابل للتمييز عن التوزيع الكلاسيكي .



الشكل 8–3 التوزيعان الكلاسيكي والكماتي للاحتمالية بالنسبة لمتذبذب توافقي بسيط متدني الطاقة $(E = \frac{5}{2}\hbar\omega_0)$:



الشكل 8–4 التوزيعان الكلاسيكي والكماتي للاحتمالية بالنسبة لمتذبذب توافقي بسيط طاقته أعلى ، نوعاً ما ، من تلك التي في الحالة (8–3) حيث $(E = \frac{21}{2}\hbar\omega_0)$

8-3 مبدأ التوافق وعلاقة عدم التحديد .

لقد وجدنا فيما سبق أن الفرق الأساسي بين الميكانيك الكلاسيكي وميكانيك الكم يكمن في كون الملحوظات المتنامة لا تقبل القياس الدقيق في الوقت نفسه . وبيَّنت المناقشة في الفصل الثاني أن حصيلة عدم التحديد أثناء قياسات زوج من ملحوظات كهذه تساوي مقداراً يناهز ثابت بلانك ، وهو رقم صغير وفقاً للمقاييس الحجمية . وإن الدراسة السابقة ، التي كانت على الأغلب نوعية الطابع ، سوف تعاد الآن بلغة يغلب عليها الطابع الكمي .

إن « عدم التحديد » في موضع الجسيم يجب أن يتخذ معنى دقيقاً معيناً : فمربع عدم التحديد في كمية محددة سوف يعرَّف على أنه متوسط مربع الانحراف عن القيمة المتوسطة . ويساوي الانحراف عن القيمة المتوسطةما يلي :

$$\Delta x \equiv x - \langle x \rangle \qquad (8-18)$$

وبالتالي فان القيمة المتوقعة لمربع الانحراف أو متوسط مربع الانحراف تُعطى بالعلاقة التالية :

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int \bar{\psi} (\Delta x)^2 \psi \, dx = \int |\Delta x \psi|^2 \qquad (8-19)$$

وإذا ما حددنا ، وعلى نحو مشابه ، مربع عدم التحديد في الزخم ، سيكون جداء مربعَيْ عدم التحديد Π كما يلي :

$$\Pi \equiv \langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p_x^2 \rangle \qquad (8-20)$$

وسنستخدم أثناء الشرح اللاحق **متراجحة شوارتز** ، والتي تكتب على الشكل التالي :

$$\int |f|^2 \, dx \cdot \int |g|^2 \, dx \geq \left| \int \bar{f} g \, dx \right|^2 \qquad (8-21)$$

وحين نطبق متراجحة شوارتز على جداء مربعَيْ عدم التحديد من المعادلة (20-8) نحصل على :

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p_x^2 \rangle \geq \left| \int \bar{\psi} \, \Delta x \, \Delta P_x \psi \, dx \right|^2 = |\langle \Delta x \, \Delta p_x \rangle|^2 \qquad (8-22)$$

ويمكن التعبير عن المؤثر الذي يظهر في االتكامل في الطرف الأيمن من هذه المعادلة بالشكل التالي :

$$\begin{aligned}\Delta x\,\Delta P_x &= \tfrac{1}{2}[\Delta x, \Delta P_x] + \tfrac{1}{2}(\Delta x\,\Delta P_x + \Delta P_x\,\Delta x)\\ &= \frac{i\hbar}{2} + \tfrac{1}{2}(\Delta x\,\Delta P_x + \Delta P_x\,\Delta x)\end{aligned} \qquad (8-23)$$

وبالتالي ، يمكن كتابة الطرف الأيمن من المعادلة (8−22) كالآتي :

$$|\langle\Delta x\,\Delta p_x\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{4} + \tfrac{1}{4}\langle\Delta x\,\Delta p_x + \Delta p_x\,\Delta x\rangle^2 \qquad (8-24)$$

وتظهر هذه النتيجة لأن الحدين اللذين في يمين المعادلة (8−23) ، لهما قيمتان متوقعتان الأولى خيالية والثانية حقيقية .

(الحد الثاني هو مؤثر هرميتي ذو قيم مميزة حقيقية وله بالتالي قيمة متوقعة حقيقية). يجب أن يكون الحد الثاني في الطرف الأيمن من المعادلة (8−24) موجباً ، وكما سنبين لاحقاً ، يجب أن يساوي الصفر مما يقودنا الى المتراجحة التالية :

$$\langle\Delta x^2\rangle\langle\Delta p_x^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \qquad (8-25)$$

وتمثل هذه العلاقة صياغة دقيقة لمبدأ عدم التحديد ، وتحديداً : جداء متوسط مربع الانحراف في قيمة الاحداثي x ومتوسط مربع الانحراف في قيمة الزخم الموافق للاحداثي x أكبر أو يساوي $(\hbar/2)^2$.

8−4 الدالة الموجية في الحد الأصغري من عدم التحديد .

من الهام تحديد الشروط التي تتحول ضمنها المتراجحة (8−25) الى مساواة . وثمة شرطان يجب فرضهما في وقت واحد : أولاً أن تصبح متراجحة شوارتز (22−8) مساواةً ؛ وثانياً ، أن يضمحل الحد الثاني في الطرف الأيمن من المعادلة (24−8). ويعني الشرط الأول والقاضي باستحالة متراجحة شوارتز الى مساواة أن :

$$f = \alpha g \qquad (8-26)$$

حيث : α − أي عدد مركب . وحين يطبق هذا الشرط على (8−22) يؤول الى :

$$\Delta x\psi = \alpha\, \Delta P_x \psi \qquad (8-27)$$

أما الشرط الثاني القاضي باضمحلال الحد الثاني في يمين المعادلة (8-24) فيمكن كتابته كالتالي :

$$\int \bar{\psi}(\Delta x\, \Delta P_x + \Delta P_x\, \Delta x)\psi\, dx = 0 \qquad (8-28)$$

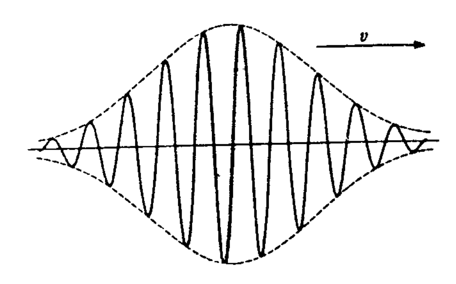
ويقود الجمع بين الشرطين الى :

$$(\bar{\alpha} + \alpha)\int \bar{\psi}(\Delta P_x)^2 \psi\, dx = 0 \qquad (8-29)$$

ونظراً لأن التكامل في هذه المعادلة الأخيرة يجب أن يكون مُعرَّفاً إيجابياً (أي أكبر من الصفر)، فإن α يجب أن يكون عدداً خيالياً صرفاً . ويمكن في ظل هذين الشرطين مكاملة المعادلة (8-27) لتعطي النتيجة التالية كدالة مستنظمة :

$$\psi(x) = \left[\frac{1}{2\pi\langle\Delta x^2\rangle}\right]^{1/2} \exp\left[-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{4\langle\Delta x^2\rangle} + \frac{i\langle p_x\rangle x}{\hbar}\right] \qquad (8-30)$$

فالدالة الموجية التي تضمن الحد الأدنى لجداء عدم تحديد الموضع والزخم ، هي رزيمة موجية غاوسية ، مما يعني أن غلاف الرزيمة الموجية (أي الدالة المضروبة بموجة مستوية دورية صرف) هي دالة غاوسية ، وهذا ما يبنيه الشكل (8-5).



الشكل 8-5 تمثيل تخطيطي للرزيمة الموجية في الحد الأدنى من عدم التحديد ، حيث يبدو الجزء الحقيقى من الدالة الموجية . ويكون غلاف الرزيمة الموجية من النوع الغاوسي .

5-8 مبدأ عدم التحديد والمتذبذب التوافقي البسيط .

سوف نطبق الآن النتائج المستخلصة أعلاه على حالة المتذبذب التوافقي البسيط ذي البعد الواحد ، وتحديداً على حالته الدنيا . لقد رأينا أن طاقة هذا المتذبذب التوافقي في حالة الطاقة الدنيا تساوي $\frac{1}{2}\hbar\omega$. ومن وجهة النظر الخاصة بمبدأ عدم التحديد فإن هذه الطاقة الدنيا المتميزة عن الصفر ، هي نتيجة كان يجب توقعها . فلو كان المتذبذب التوافقي البسيط يملك طاقة تساوي الصفر ، لتعين على طاقتيه الحركية والكامنة أن تساويا الصفر كلاً على حدة في حين أن كلتيهما موجبتان . ولكن الحالة التي تكون الطاقة الكامنة فيها مساوية الصفر ، توافق المعرفة المحددة بأن الجسيم يقع في نقطة التوازن . وهذا ما يوافق معرفة الموضع بدقة صارمة ويعني ضمناً أن الزخم غير محدد كلياً . ولكن عدم التحديد الكلي هذا في الزخم سوف يعني أن القيمة المتوسطة للطاقة الحركية ستكون لانهائية . ومن ناحية ثانية ، حين تساوي الطاقة الحركية الصفر ، يتوجب أن تكون الطاقة الكامنة لا نهائية . وبالتالي فإن مجرد الاقرار بمبدأ عدم التحديد يعني أن الطاقة الدنيا للمتذبذب التوافقي البسيط يجب أن لا تكون صفراً . وفي الواقع ، يمكن للمرء ، وببساطة ، أن يحسب طاقة الحالة الدنيا للمتذبذب التوافقي مستخدماً مبدأ عدم التحديد مع مقدمات معقولة أخرى ، وهذا ما سنقوم به . وإذا كتب ما قيل بوضوح ، فسيكون لدينا ما يلي :

$$\overline{\langle \tfrac{1}{2}kx^2 \rangle} = \overline{\left\langle \frac{1}{2m}\, p_x^2 \right\rangle} = \frac{E_0}{2} \qquad (8-31)$$

ومن ناحية أخرى ينص مبدأ عدم التحديد على أن :

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \qquad (8-32)$$

ومن الواضح ، وفي حالة المتذبذب التوافقي البسيط أن القيمتين المتوسطتين لـ x و Px تساويان كلتاهما الصفر ، وبالتالي :

$$\overline{\langle x^2 \rangle} = \langle (\Delta x)^2 \rangle, \qquad \overline{\langle p_x^2 \rangle} = \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \qquad (8-33)$$

وبالدمج بين هذه المعادلات سنحصل على النتيجة التالية :

$$\sqrt{\frac{1}{2m}\, \overline{\langle p_x^2 \rangle}\, \frac{k}{2}\, \overline{\langle x^2 \rangle}} = \tfrac{1}{2}E_0 \geq \tfrac{1}{4}\hbar\omega \qquad (8-34)$$

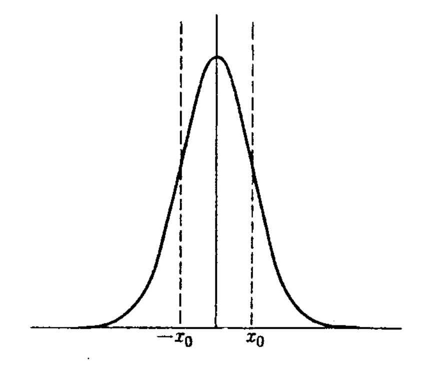
واذا افترضنا أن هذه المتراجحة يجب أن تؤخذ بالنسبة لحالة الطاقة الدنيا فقط كمساواة ، فسوف نحصل على النتيجة الدقيقة لأجل طاقة الحالة الدنيا للمتذبذب التوافقي البسيط :

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad (8-35)$$

تكون الدالة الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط في حالته الدنيا ممثلة في الشكل (6-8) كدالة تابعة للموضع ، ويظهر في الشكل خطّان متقطعان إحداثياهما $-x_0$ و $+x_0$ ، وهما الحدان الكلاسيكيان للحركة . وتُعطى x_0 بالعلاقة :

$$\tfrac{1}{2}kx_0^2 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad (8-36)$$

يتوجب كلاسيكياً على الجسيم ، الذي يمتلك طاقة الحالة الدنيا أن يكون قادراً على التذبذب بين الحدين $+x_0$ و $-x_0$ ، لكن لايجوز له التحرك الى ما وراء هذين الحدين ، إذ إن طاقته الكامنة ستفوق طاقته الاجمالية لو قُيِّض له أن يوجد خارج الحدين المذكورين . وعلى صعيد آخر ، يتضح من التفسير الاحتمالي للدالة الموجية أن كثافة الاحتمالية بالنسبة لوضع الجسيم لا تساوي الصفر في ما وراء هذين الحدين ضمن شكلانيةميكانيك الكم . ولذا ينشأ ، عندئذ ، سؤال حول كيف يمكن تأكيد قانون حفظ الطاقة اذا كان من الممكن ملاحظة الجسيم في مكان تفوق الطاقة الكامنة فيه الطاقة الاجمالية ؟ ومن الواضح ، أن الامكان الذي يخطر في البال حالاً ، وهو امكان وجود طاقة حركية سالبة ، لا يبدو معقولاً ؛ لأن ذلك سيقتضي أن يتخذ زخم الجسيم قيماً هي أعداد خيالية .



الشكل 8-6 الدالة الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط في حالته الدنيا . ويشار الى الحدين الكلاسيكيين للحركة بخطين شاقوليين متقطعين في $\pm x_0$.

يمكن حل التناقض عندما نلاحظ أن القياس ، الذي يجري لتحديد ما إذا كان الجسيم موجوداً في المنطقة الممنوعة كلاسيكياً ، يستلزم المفاعلة مع الجسيم ، وهذه ـ على العموم ـ تغيّر طاقته . فبعد إجراء القياس ، الذي يحصر الجسيم في المنطقة الممنوعة كلاسيكياً ، نجد أن هذه المنطقة لم تعد ممنوعة ، ذلك لأن الجسيم يستطيع الآن امتلاك ما يكفي من القيم الكبيرة للطاقة ، وبما يجعل هذه المنطقة مباحة له .

8-6خلاصة .

تناولنا في هذا الفصل مبدأ التوافق وترابطه مع علاقات المبادلة بين المؤثرات في شكلانية ميكانيك الكم . ولقد وجدنا أن القيم المتوقعة والمرافقة للرزيمات الموجية في ميكانيك الكم تحقق معادلات للحركة تطابق تلك المعادلات التي تلبيها الكميات الكلاسيكية الموافقة لهذه القيم . كما وجدنا أن المشتقة الزمنية للقيمة المتوقعة لمؤثر ما مرتبطة بشكل مباشر مع علاقة المبادلة بين هذا المؤثر ومؤثر هاملتون الخاص بالجسيم . وبالتالي ، فإن علاقات المبادلة مرتبطة ارتباطاً صميمياً مع المعادلات الكلاسيكية للحركة ، وهي كذلك مرشد مفيد في اختيار المؤثرات الصحيحة .

لقد نوقشت حركة الرزيمة الموجية في المتذبذب التوافقي البسيط بوصفها مثالاً على ما هو مقصود بالتوصيف الكلاسيكي للجسيم ضمن شكلانية ميكانيك الكم . ثم وردت مناقشة كمية لعلاقة عدم التحديد مع تعريفات دقيقة لعدم التحديد في الموضع والزخم . ولقد بيّنا أن الرزيمة الموجية الغاوسية توافق حالة الحد الأدنى من عدم التحديد . وأخيراً ، تم استخدام مبدأ عدم التحديد لأجل الحصول على طاقة الحالة الدنيا للمتذبذب التوافقي البسيط ذي البعد الواحد .

مسائل

8-1 متذبذب توافقي بسيط وحيد البعد في حالة يمكن لقياس الطاقة فيها أن يسفر عن $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ أو $\frac{3}{2}\hbar\omega_0$ باحتمالية تساوي النصف لكل من القيمتين . يعطى قياس زخم الجسيم في لحظة الزمن $t=0$ قيمة متوسطة كبيرة بقدر ما يسمح به من قيمة موجبة شرط الطاقة الوارد أعلاه .

أ) احسب القيم المتوسطة التالية كدالات زمنية $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle\frac{1}{2}kx^2\rangle$, $\langle p^2/2m\rangle$, $\langle H\rangle$

ب) قارن هذه النتائج مع تلك التي تنتج عن الميكانيك الكلاسيكي بالنسبة للمتذبذب ذي الطاقة $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$. لاحظ هنا التأثيرات الناجمة عن طاقة نقطة الصفر $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$.

8–2 تأكّد من صحة مبرهنة إهرنفست لأجل حالة جسيم في المجال الكهرمغناطيسي . وبكلام آخر انطلاقاً من العلاقات :

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H, F]\rangle + \left\langle\frac{\partial F}{\partial t}\right\rangle,$$

$$H = \frac{1}{2m}\Pi\cdot\Pi + e\phi, \qquad \Pi \equiv P - \frac{e}{c}A,$$

بيِّن أن :

$$\frac{d}{dt}\langle r\rangle = \left\langle\frac{1}{m}\Pi\right\rangle,$$

$$\frac{d}{dt}\langle\Pi\rangle = \langle \text{قوة لورنتز} \rangle$$

8–3 جسيم كتلته m مضطر للتحرك على طول سلك لانهائي بدون احتكاك . افترض أن القياس الجاري على النظام في لحظة الزمن t = 0 ، يبين أن الدالة الموجية هي : $\psi = A\exp(-ax^2)$

أ) احسب $\langle\Delta x^2\rangle\langle\Delta p_x^2\rangle$ كدالة تابعة للزمن .

ب) كيف يتوقف ذلك على a ؟

8–4 إحدى الخواص الهامة للمتذبذب التوافقي البسيط هي وجود الدالات الموجية على شكل رزيمات موجية تتذبذب دون تغير في مظهرها . ويبدو أن هذه صفة فريدة للمتذبذب التوافقي . بيِّن أن الدالة الموجية التي تملك الشكل الأولي :

$$\psi(x, 0) = u_0(x + a), \qquad t = 0$$

تمثل حلاً من نوع الرزيمات الموجية . تمثل u_0 هنا الدالة الموجية لحالة الطاقة الدنيا .

[توجيه : أ) كخطوة تمهيدية ، بيِّن أن :

$$u_0(x + a) = u_0^{-1}(0)u_0\left(\frac{a}{\sqrt{2}}\right)u_0^{-1}(x)\exp\left(\frac{iPa}{2\hbar}\right)u_0^2(x)$$

حيث المؤثر $\exp(iPa/2\hbar)$ معرَّف من خلال النشر في سلسلة :

$$\exp\left(\frac{iPa}{2\hbar}\right) \equiv 1 + \frac{iPa}{2\hbar} + \frac{1}{2!}\left(\frac{iPa}{2\hbar}\right)^2 + \cdots$$

ب) إستخدم كلاً من نتيجة المسألة (6−7) والمعادلتين (6−73) و (6−88) لكي تبين أن :

$$\psi(x, t) = u_0^{-1}(0) u_0 \left(\frac{a}{\sqrt{2}}\right) \exp\left(-\tfrac{1}{2} i\omega t\right) u_0^{-1}(x) \exp\left[i \frac{Pa}{2\hbar} \exp(-i\omega t)\right] u_0^2(x)$$

ج) احسب هذه الدالة بشكلها الصريح ، وبين أنها تمثل دالة موجية تتذبذب دون أن يطرأ تغير على مظهر الغلاف . ارسم الدالة تقريبياً لأجل $t = 0$ و $t = \pi/2\omega$. ولاحظ أن العدد الموجي للجسيم يتذبذب دورياً].

8−5 استخدم الدالة الموجية في المسألة (8−4) لحساب القيم المتوقعة لأجل الملحوظات $H, P, x, P^2/2m, \frac{1}{2}kx^2$ ، وقارن هذه النتائج مع تلك الخاصة بمتذبذب كلاسيكي سعته a .

الفصل التاسع

الزخم الزاويّ

9–1 مؤثرات الزخم الزاوي المداري .

لم تجرِ خلال الاستعراض السابق أية مناقشة للزخم الزاوي ولا للشكل الذي يجب أن تتخذه مؤثرات الزخم الزاوي ، بحيث تنتج عن ذلك شكلانية متماسكة مع النظرية الكماتية المستعرضة حتى حينه . ويمكن في الميكانيك الكلاسيكي صياغة العلاقة بين المركّبة والزخم الزاوي للجسيم حول محور ما و موضع هذا الجسيم وزخمه الخطي ، وذلك كما يلي :

$$L_z \equiv xp_y - yp_x \qquad (9-1)$$

ويمكن الحصول على المركبتين الديكارتيتين الأخريين للزخم الزاوي المداري من التعبير السابق بوساطة التطبيق المتكرر للتبديل الدوري $x \to y,\ y \to z,\ z \to x$.

وبهدف العثور على مؤثرات الزخم الزاوي في ميكانيك الكم يتم استخدام المطالبة بتحقق مبدأ التوافق . وهكذا فإن أية علاقة تظهر في الميكانيك الكلاسيكي يجب أن تصلح كعلاقة بين القيم المتوقعة . ويجب التذكير بأن إحدى الطرائق الجزئية ، التي يتم بموجبها إدخال متطلبات مبدأ التوافق الى ميكانيك الكم ، هي ما ورد في الفرضية 7 (الفصل السادس) من مطالبة بأن تُعطى المبدِّلات عبر أقواس بواسون .

ومن الجلي أيضاً ، أن الحصول على العلاقات الكلاسيكية بين القيم المتوقعة للمؤثرات ممكن اذا كانت العلاقات بين المؤثرات ذاتها كلاسيكية . لذا ، فإن إحدى الجمل الممكنة من التعابير الخاصة بمؤثرات الزخم الزاوي يمكن استخلاصها بأخذ التعابير الكلاسيكية المصاغة بلغة موضع الجسيم وزخمه ، ثم استبدال الكميات الكلاسيكية المماثلة فيها بالمؤثرات الموفقة . وكمثال فإن العلاقة التي تنتج لأجل المركّبة Z من الزخم الزاوي المداري هي :

$$\mathbf{L}_z = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) - y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad (9-2)$$

وقد تتعثر هذه الطريقة في الحصول على المؤثرات اذا كان المؤثر الناتج عنها ليس وحيد التعريف ، وذلك بسبب الالتباس الذي ينجم عن عوامل عدم المبادلة . ولايتمتع المؤثر الوارد في (2−9) بعوامل عدم مبادلة ، وهو بالتالي غير محاط بالتباس . وبقصد التأكد من صحة المعادلة ، يمكن النظر في علاقات المبادلة التالية ، التي تنتج عن المعادلة (2−9):

$$[L_z, x] = i\hbar y, \qquad [L_z, P_x] = i\hbar P_y, \qquad (9-3)$$
$$[L_z, y] = -i\hbar x, \qquad [L_z, P_y] = -i\hbar P_x$$

وبهدف مقارنتها مع المعادلات الكلاسيكية الموافقة لها ، والتي تستخدم أقواس بواسون . إننا نجد أن هذه الطريقة في الحصول على مؤثرات الزخم الزاوي هي على انسجام مع الفرضية 7 في الفصل السابع .

يمكن الحصول من المعادلات (3−9) على علاقات المبادلة بين مختلف مركبات الزخم الزاوي لتكون :

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \qquad [L_y, L_z] = -i\hbar L_z,$$
$$[L_x, L_z] = -i\hbar L_y, \qquad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \qquad (9-4)$$
$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y,$$
$$[L_z, L_y] = -i\hbar L_x$$

ويجب أن نلاحظ أن مؤثرات المركّبات الثلاث للزخم الزاوي لا يتبادل أحدهما مع الآخر ، وهي ـ اعتماداً على نتائج الفقرة (1−6) ـ غير قابلة للقياس المتزامن .

وتساوي الكمية الفيزيائية الأخرى ذات الأهمية البالغة مربع مقدار الزخم الزاوي أو مجموع مربعات المركّبات الثلاث للزخم الزاوي . وتأخذ علاقة المؤثر الموافق لهذه الكمية الشكل التالي :

$$L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \qquad (9-5)$$

وبناءً على المعادلات (4−9) يتبادل المؤثر L^2 مع كل المركبات الثلاث للزخم الزاوي :

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 \qquad (9-6)$$

ويمكن كتابة هذه العلاقات بوساطة الترميز المتجهي :

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}] = 0 \qquad (9-7)$$

وبما أن المركبة z من الزخم الزاوي ومربع هذا الزخم يتبادل أحدهما مع الآخر ، فمن الممكن اختيار الدالات مميزة ، بحيث تكون دالات مميزة مشتركة للمؤثرين كليهما . وعندئذٍ يكون :

$$L^2\psi = a\psi \qquad (9-8)$$

$$L_z\psi = b\psi \qquad (9-9)$$

ويتضح لنا من المعادلة (5-9) أن القيم المتوقعة لـ L^2 و L_z^2 تلبي العلاقة التالية :

$$\langle L^2 \rangle \geq \langle L_z^2 \rangle \qquad (9-10)$$

ومن هنا ينتج أن :

$$a \geq b^2 \qquad (9-11)$$

ومن المفيد هنا أن نعرِّف مؤثرين يلعبان دوراً مشابهاً لدور مؤثري المرقاة اللذين استخدما في مسألة المتذبذب التوافقي البسيط ، ونقصد بذلك المؤثرين :

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y \qquad (9-12)$$

إنه لمن السهولة بمكان بوساطة الضرب المباشر ، وباستخدام معادلات المبادلة (4-9) أن نتحقق من العلاقة :

$$L_{\pm}L_{\mp} = L^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z \qquad (9-13)$$

ونبينِّ بوساطة المبدِّلات الأخرى الخاصة بالزخم الزاوي أنه :

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm} \qquad (9-14)$$

وتفيد هذه المعادلة بأن المؤثرين $L+$ و $L-$ يلعبان دور مؤثري المرقاة ، وذلك فيما يخص معادلة القيمة المميزة (9-9) : اذا ضربنا الطرف الأيسر من المعادلة (9-9) بـ $L+$ واستخدمنا المعادلة (14-9) ، فسنحصل على :

$$L_z(L_+\psi) = (b + \hbar)(L_+\psi) \qquad (9-15)$$

وهذه معادلة جديدة للقيم المميزة ، وقيمتها المميزة الجـديدة هي $(b + \hbar)$ ، أما دالتها المميزة الجديدة فهي $(L_+\psi)$ ولأن L^2 يبادل كل المركبات الثلاث لـ L فمن الواضح أنه اذا ضربنا المعادلة (9–8) بـ +L نحصل على :

$$L^2(L_+\psi) = a(L_+\psi) \qquad (9-16)$$

وهكذا فإن المؤثر + L يؤثر في الدالة المميزة المشتركة Lz و L^2 في آن واحد ، ويولد دالة مميزة جديدة مشتركة في وقت واحد أيضاً بين هذين المؤثرين كليهما ، بحيث أن القيمة المميزة لـ L^2 تبقى دونما تغيير ، في حين تزداد القيمة لـ Lz بمقدار $\hbar$: تملك القيمة المميزة b سقفاً ، أعلى وإلا فإن المتراجحة (9–11) سوف تختل . ولهذا السبب ، وإذا افترضنا أن b هي القيمة المميزة الأكبر الموائمة للمتراجحة (9–11) ، فيمكن ، عندئذٍ ، أن تتحقق المعادلة (9–15) فقط في حالة الصفر ، وذلك عندما تتلاشى الدالة المميزة في كل مكان :

$$L_+\psi = 0 \qquad (9-17)$$

وإذا ضربنا الطرف الأيسر لهذه المعادلة بـ − L واستخدمنا المعادلة (9–13) ، فإن النتيجة هي :

$$L_-L_+\psi = (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z)\psi = 0 \qquad (9-18)$$

ومن هنا ، ومن المعادلتين (9–8) و (9–9) ، نحصل على :

$$a = b(b + \hbar) \qquad (9-19)$$

وبطريقة مماثلة ، اذا ضربنا الطرف الأيسر من المعادلة (9–9) بالمؤثر − L ، واستخدمنا المعادلة (9–14) ، يمكننا الحصول على المعادلة التالية ، وذلك بعد التكرار n مرة :

$$L_z(L_-^n\psi) = (b - n\hbar)(L_-^n\psi) \qquad (9-20)$$

ومن حيث الشكل ، فإننا مرة أخرى أمام معادلة قيمة مميزة يمكن كتابتها على الشكل

التالي :

$$L_z\psi' = (b - n\hbar)\psi' \qquad (9-21)$$

حيث :

$$\psi' \equiv L_-^n\psi \qquad (9-22)$$

من الواضح أنه يمكن جعل القيمة المميزة $(b - n\hbar)$ تتزايد دون سقف ، وذلك من خلال زيادة n بالقدر الكافي . ولهذا لابد أن تكون هناك قيمة عليا لـ n من شأنها تلبية المتراجحة (9—11) . ولنفرض أن n هي تلك القيمة العليا . فاذا كانت هذه هي الحال ، فإن تطبيق المؤثر L_- في ψ' يجب ، عندئذٍ ، أن يعطي صفراً :

$$L_-\psi' = 0 \qquad (9-23)$$

واذا ضربنا الطرف الأيسر من هذه المعادلة بـ L_+ ، واستخدمنا المعادلة (13—9) ، فإن النتيجة هي :

$$\begin{aligned} L_+L_-\psi' &= (L^2 - L_z^2 + \hbar L_z)\psi' \\ &= [a - (b - n\hbar)^2 + (b - n\hbar)\hbar]\psi' = 0 \end{aligned} \qquad (9-24)$$

ومن هنا نجد أن :

$$a = (b - n\hbar)^2 - (b - n\hbar)\hbar \qquad (9-25)$$

وبدمج هذه المعادلة مع المعادلة (9—19) ، يمكن استبعاد a ، وينتج أن :

$$0 = -2bn\hbar - 2b\hbar + n\hbar^2 + n^2\hbar^2 \qquad (9-26)$$

مما يؤدي ، بدوره ، الى :

$$2b(n + 1) = n(n + 1)\hbar \qquad (9-27)$$

وبما أن n يجب أن تكون موجبة ، يمكن كتابة هذه العلاقة كالآتي :

$$b = \tfrac{1}{2}n\hbar \equiv l\hbar \qquad (9-28)$$

ومن هنا فإن ℓ عدد موجب ، وهو إما صحيح أو نصف صحيح ، مما يتوقف على كون n شفعية أو وترية .

سوف نبين باختصار*، أن ℓ ، بالنسبة للزخم الزاوي المداري ، والذي نحن بصدده الآن ، تتخذ فقط قيماً صحيحة :

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad (9-29)$$

أما مدلول القيم الوترية لـ n فسوف يناقش لاحقاً . وعند تعويض قيمة b من المعادلة (9–28) في المعادلة (9–19) نحصل على القيمة المميزة لمربع الزخم الزاوي :

$$a = l\hbar(l\hbar + \hbar) = l(l+1)\hbar^2 \qquad (9-30)$$

يمكن الآن اجمال الاستعراض الذي سبق بكتابة المعادلتين (9–8) و (30–9) والمعادلتين (9–9) و (9–28) كما يلي :

$$L^2\psi_{lm_l} = l(l+1)\hbar^2\psi_{lm_l} \qquad (9-31)$$

$$L_z\psi_{lm_l} = m_l\hbar\psi_{lm_l} \qquad (9-32)$$

طرأ هنا تغيير طفيف على الترميز ، فاكتسبت الدالة الموجية دليلين هما ℓ و m_ℓ يوافقان القيم المميزة للمؤثرين L^2 و Lz . ويمكن للدليل l فقط اتخاذ قيم صحيحة موجبة $\ell=0,1,2,\ldots$ ، أما الدليل $m\ell$ فيمكنه اتخاذ قيم صحيحة موجبة أو سالبة ، بحيث يكون $l \geq |m_l|$. وتنتج المعادلتان (9–31) و (9–32) ، بشكل مباشر من علاقات المبادلة الخاصة بالزخم الزاوي ، أي أنهما تنجمان فقط عن الخواص الجبرية للمؤثرات .

لنلاحظ أن مركَّبة واحدة فقط من مركبات الزخم الزاوي يمكنها أن تحصل على توصيف دقيق في كل مرة ، وذلك لأن هذه المركبات لاتتبادل . وعليه فإن اختيار L^2 و Lz بمثابة مؤثرين متبادلين اختيار كيفي . فكون هذه الدالات الموجية تفرد اتجاهاً معيناً في الفراغ لأجل الدراسة الخاصة ، يعني فقط أن هنالك حاجة لقياس المركَّبة المخصصة قبل معرفة أية حالة من الحالات المعنية والتي سيشغلها النظام . وكأن بإمكان Lx أو Ly أن تُستَخدم بالقدر نفسه في المعادلة (9–32) بدلاً من Lz .

وعلى الرغم من أن المعرفة المتزامنة لاثنتين من مركبات الزخم الزاوي مستحيلة ، يمكن قول شيء ما عن المركبات غير المعروفة . فمثلاً ، بالنسبة للجسيم ، الذي يقع في الحالة ذات الزخم الزاوي المعطى بالمعادلتين (9–31) و (32–

9) ، تكون القيمتان المتوقعتان لـ Lx و Ly صفراً :

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0 \qquad (9-33)$$

وهذا ما يتضح من كتابة العلاقة التالية :

$$L_x = \tfrac{1}{2}(L_+ + L_-) \qquad (9-34)$$

ولحساب القيمة $\langle L_x \rangle$ نجد أن :

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \tfrac{1}{2}\langle L^2 - L_z^2 \rangle = \tfrac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2 \qquad (9-35)$$

ويجب أن نلاحظ أنه عندما يكون الزخم الزاوي « موازياً » للمحور z $(m= \ell)$ فان المركبتين x و y لاتساويان الصفر ، وعلى الرغم من كل ما ذكر آنفاً .

من المفيد تصوير النتائج الواردة في هذه الفقرة بمساعدة نموذج هندسي . لنفترض أن طول متجه الزخم الزاوي $\vec{L}$ يساوي $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ ، وأن الـ $(2l+1)$ مسقطاً ، والتي يمكن أن يملكها هذا المتجه على محور Z تعطى عبر $m_\ell \hbar$ ، حيث $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$

ويجب أن نلاحظ أن المسقط على المحور Z لا يبلغ أبداً طول المتّجه ذاته . فمتّجه الزخم الزاوي يمكن تصويره ، إذاً ، بأنه يقع على سطح مخروط ، محوره هو المحور Z وارتفاعه يساوي $m_l \hbar$ ، وكل الوضعيات على سطح المخروط متساوية الاحتمالية . ومن الواضح أن هذا النموذج على وفاق مع المعادلتين (33—9) و (35—9) .

2—9 الدالات الموجية للزخم الزاوي المداري .

لننظر الآن في موضوع الدالات الموجية للزخم الزاوي المداري والتي هي دالات مميزة مشتركة بين المؤثرين L^2 و Lz . إنه لمن المفيد إدخال الإحداثيات الكروية للجسيم على النحو الاعتيادي

---

* يمكن رؤية ترميز وتقانات مشابهة لتلك التي ستستخدم ضمن هذه الفقرة في كتاب :

E. U. Condon and G. H. Shortley, *Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, 1951, Chapter 3.

$$x = r \sin \theta \cos \phi,$$
$$y = r \sin \theta \sin \phi, \qquad (9-36)$$
$$z = r \cos \theta$$

ويتخذ مؤثر المركبة Z للزخم الزاوي المداري للجسيم ، وفي لغة هذه الاحاثيات الكروية ، شكله التالي :

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \qquad (9-37)$$

وعندما يتم تعويض المؤثر Lz بشكله هذا في المعادلة (9—32) ، فإن المعادلة التفاضلية الجزئية ، والتي تنتج عن ذلك ، يمكن حلها بسهولة :

$$\psi_{lm_l} = \exp(im_l\phi) f(r, \theta) \qquad (9-38)$$

حيث يتوجب أن يتخذ m_ℓ قيماً صحيحة اذا كانت الدالة الناتجة وحيدة القيمة . فلطالما تمَّ إبداء هذا الافتراض (الفرضية 1 الفصل السادس) فمن الضروري أن يتخذ m_ℓ ـ وبالتالي ℓ قيماً صحيحة في حالة الزخم الزاوي المداري . ويبرر هذا الافتراض الذي أبدي لاحقاً بمناسبة المعادلة (9—29) . أما مؤثرا المرقاة المعرَّفان في المعادلة (9—12) ، فهما في لغة الاحداثيات الكروية كالآتي :

$$L_\pm \equiv L_x \pm iL_y = \hbar \exp(\pm i\phi) \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \qquad (9-39)$$

ويمكننا ، وعلى نحو مماثل ، أن نحسب بسهولة المؤثر L^2 انطلاقاً من هذا التعبير لـ $L \pm$ ، ومن المعادلة (9—37) لـ Lz ، والمعادلة (9—13) ، والتي تربط L^2 بـ $L \pm$ و Lz . وسوف تكون النتيجة كالآتي :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \qquad (9-40)$$

ونستطيع من خلال المقارنة بين هذه العلاقة وصيغة مؤثر لابلاس في الاحداثيات الكروية :

$$\nabla^2 \equiv \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \qquad (9-41)$$

رؤية أن المؤثر الخاص بمربع الزخم الزاوي هو ، من حيث الجوهر الجزء الزاوي من مؤثر لابلاس . وبالتالي فان مؤثر الطاقة الحركية وفي حالة الحركة ثلاثية الأبعاد ، وبلغة مؤثر لابلاس ، يكون :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{1}{2m}P_r^2 + \frac{L^2}{2mr^2} \qquad (9-42)$$

إن هذا التعبير له تفسير بسيط في لغة الميكانيك الكلاسيكي ، الذي يسمح بالتعبير عن الطاقة الحركية للجسيم على أنها مجموع الطاقة الحركية المقترنة بالحركة في الاتجاه الشعاعي والطاقة الحركية المقترنة بالحركة في اتجاهات تشكل زوايا قائمة مع المتجه الشعاعي . فالطاقة الحركية للجزء الزاوي من الحركة تتخذ قيمة الحد الثاني في الطرف الأيمن من المعادلة (42−9) ، بينما يمكن التعبير عن الطاقة الحركية المرافقة للحركة الشعاعية بلغة المؤثر الشعاعي ، الذي يعرَّف هكذا :

$$P_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r \qquad (9-43)$$

مع العلم أن هذا لا يمثل المركَّبة r من زخم الجسيم .

واذا كان الدليل m_l يتخذ قيمته الأعظمية بالنسبة لـ ℓ محددة أي أن $m_l = l$ ، فان مؤثر المرقاة $L+$ ، وعند تطبيقه على الدالة المميزة المعنية ، يجب أن يعطي صفراً :

$$(L_x + iL_y)\psi_{ll} = 0 = \hbar\exp(i\phi)\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\exp(il\phi)\Theta_{ll}(\theta) \qquad (9-44)$$

بما أن مؤثرات الزخم الزاوي في هذه المعادلة هي دالات فقط للمتغيرات الزاوية ، فإن التبعية لـ r قد تم إغفالها ، وشكل التبعية الزاويَّةمعطى بالمعادلة (38−9) . وبشكل عام تنطوي الدالة الموجية على دالة لـ r تكون بمثابة عامل ، بالاضافة الى حد يتضمن هذه التبعية الزاويَّة . ويمكن اختزال المعادلة (44−9) بسهولة الى معادلة تفاضلية عادية :

$$\frac{d\Theta_{ll}}{d\theta} = l\cot\theta\,\Theta_{ll} \qquad (9-45)$$

لها حلٌ هو :

$$\Theta_{ll} = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!} \sin^l \theta \qquad (9-46)$$

لقد تم اختيار المعامل العددي في يمين هذه المعادلة ، بحيث يضمن استنظام Θ_{ll} ، أي أن :

$$\int_0^{\pi} |\Theta_{ll}(\theta)|^2 \sin \theta \, d\theta = 1 \qquad (9-47)$$

فإذا عوضنا هذه الدالة في المعادلة الأصلية للدالة الموجية ، فسوف نحصل على الشكل العام للدالة الموجية وذلك حين يتم توصيفها بالعدد الكمي الاجمالي ℓ للزخم الزاوي وبالعدد الكمي $m_l = l$ الموافق للمركبة z من الزخم الزاوي :

$$\psi_{ll} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(il\phi) \Theta_{ll}(\theta) f(r) \qquad (9-48)$$

لا يزال شكل الدالة التابعة لـ r غير محدد ، وتحديده ممكن فقط في ظل اعتبارات أخرى ، ذلك لأن الزخم الزاوي يتعلق فقط بالمتغيرات الزاوية . ولقد تم اختيار المعامِل الوارد في مطلع هذه المعادلة بحيث يضمن استنظام التبعية لـ ϕ في الدالة الموجية انسجاماً مع العلاقة :

$$\int_0^{2\pi} \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(il\phi) \right|^2 d\phi = 1 \qquad (9-49)$$

يعرَّف الجزء الزاوي في الدالة $(9-48)$ على أنه **توافقية كروية** ، ويعطى بالترميز التالي :

$$Y_{ll}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(il\phi) \Theta_{ll}(\theta) \qquad (9-50)$$

ويمكننا أيضاً ، وبالاستفادة من المعادلة $(9-22)$ ، أن نكتب توافقيات كروية أخرى هي دالات مميزة مشتركة للمؤثرين L^2 و L_z . فمثلاً ، اذا استخدمنا المؤثر $L-$ مرة واحدة ، يكون لدينا :

$$cL_{-} Y_{ll}(\theta, \phi) = Y_{l,l-1}(\theta, \phi) \qquad (9-51)$$

وهنا الثابت c مقيد ، بحيث تكون التوافقية الكروية ذات الدليلين ℓ و ℓ_{-1}

مستنظمة ، وذلك كما كان الأمر مع التوافقية ذات الدليلين ℓ و ℓ :

$$\int |Y_{ll}|^2 \, d\Omega = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} |Y_{ll}|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi = 1 \qquad (9-52)$$

وبتكرار هذا الاجراء ، يمكن للمرء توليد التوافقية الكروية ذات الدليلين ℓ و m (حيث استبدلنا m_l بـ m) :

$$Y_{lm} = c_{lm} L_-^{l-m} Y_{ll} \qquad (9-53)$$

ويمكن استخدام هذا الاجراء التكراري أيضاً في عملية حساب ثوابت الاستنظام ، بالاستفادة من العلاقة التالية :

$$Y_{lm} = \frac{c_{lm}}{c_{l,m+1}} L_- Y_{l,m+1} \qquad (9-54)$$

وعلاقة الاستنظام :

$$\int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \overline{Y_{lm}} Y_{lm} \sin\theta \, d\theta \, d\phi = (Y_{lm}, Y_{lm}) = 1 \qquad (9-55)$$

واذا تذكرنا أن L_+ هو القرين الهرميتي لـ L_- ، يمكننا الحصول على :

$$\left|\frac{c_{lm}}{c_{l,m+1}}\right|^2 (Y_{l,m+1}, L_+L_- Y_{l,m+1}) = 1 \qquad (9-56)$$

وبناء على المعادلة (9-13) ، يؤول ذلك الى ما يلي :

$$\left|\frac{c_{lm}}{c_{l,m+1}}\right|^2 (Y_{l,m+1}, [L^2 - L_z^2 + \hbar L_z] Y_{l,m+1}) = 1 \qquad (9-57)$$

وتؤثر المؤثرات هنا في دالاتها المميزة وتولد قيمها المميزة ، ولذا فإن المعادلة (57-9) تُختزل الى :

$$\left|\frac{c_{lm}}{c_{l,m+1}}\right|^2 (l-m)(l+m+1)\hbar^2 = 1 \qquad (9-58)$$

ونحصل بوساطة تعريفنا للثوابت c في المعادلة (9-53) على أنها ايجابية وحقيقية ، وذلك كما يلي :

$$L_- Y_{l,m+1} = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\, \hbar Y_{lm} \qquad (9-59)$$

ومن هنا ينتج ، وعبر الاجراء التكراري ، أن :

$$Y_{lm} = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \frac{1}{\hbar^{l-m}} L_-^{l-m} Y_{ll} \qquad (9-60)$$

ويمكن ، بالطبع ، كتابة هذه التوافقية الكروية على شكل جداء بين دالة لـ ϕ و دالة لـ Θ :

$$Y_{lm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi)\,\Theta_{lm}(\theta) \qquad (9-61)$$

ويمكن تحويل الاجراء التكراري الذي يظهر في (9−60) بطريقة بسيطة ، وذلك من خلال تعويض $\cos\theta$ بمثابة متغير جديد ، ثم يمكن كتابة دالة θ الناتجة عن هذا التوليد في (9−61) كما يلي :

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{2(l-m)!}} \frac{1}{2^l l!} \frac{1}{\sin^m\theta} \left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{l-m} \sin^{2l}\theta \qquad (9-62)$$

وفي الحالة ، التي يكون الدليل m فيها مساوياً الصفر $m = 0$ ، تؤول هذه المعادلة الى :

$$\Theta_{l0}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^l (\cos^2\theta - 1)^l. \qquad (9-63)$$

وهكذا فان $\Theta_{l0}(\theta)$ هي ، ببساطة ، كثيرات حدود لوجاندر :

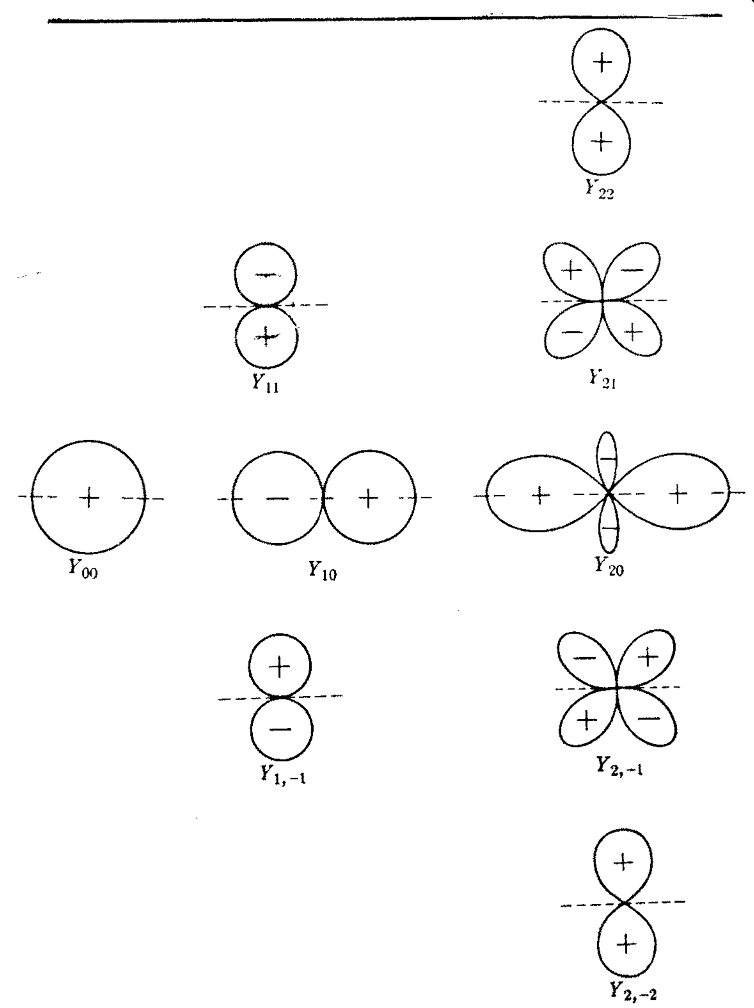
$$\Theta_{l0}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos\theta) \qquad (9-64)$$

وتُعرف المعادلة (9−63) المولِّدة لكثيرات حدود لوجاندر باسم صيغة رودريغس .

ويمكن توليد التوافقيات الكروية الأخرى من هذه (ذات الدليل $m = 0$) بوساطة المؤثرين L_+ و L_- . وحين يتم ذلك ، يمكن التعبير عن دالة θ ، أي عن المعادلة (9−62) ، بلغة كثيرات حدود لوجاندر :

$$\begin{aligned} \Theta_{lm} &= (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} \sin^m\theta \left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_l(\cos\theta), \qquad m > 0 \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} \sin^{|m|}\theta \left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{|m|} P_l(\cos\theta), \qquad m < 0 \end{aligned} \qquad (9-65)$$

وتعرف الدالات الناتجة المرسومة في الشكل (9−1) ولأجل $\phi = 0$ ، بـ دالات لوجاندر المساعِدة . ونورد أدناه التوافقيات الكروية لأجل القيم الصغرى من ℓ وm :



الشكل 9−1 التمثيل القطبي للتوافقيات الكروية في حالات $\ell = 0, 1, 2$ لأجل جميع قيم الدليل m ، بينما $\phi = 0$. ويجب أن نلاحظ أن المحور القطبي في هذا الشكل أفقي .

$$
\begin{aligned}
Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\
Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \exp(i\phi), \\
Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \\
Y_{1,-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \exp(-i\phi), \\
Y_{22} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \exp(2i\phi), \\
Y_{21} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta \exp(i\phi), \\
Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1), \\
Y_{2,-1} &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta \exp(-i\phi), \\
Y_{2,-2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \exp(-2i\phi)
\end{aligned}
\tag{9-66}
$$

وحين يكون الجسيم في حالةٍ زخمُها الزاوي المداري معروف ، ويرمز اليه بالأعداد الكمية $\ell = 0, 1, 2, 3$ ، يقال عنه إنه في الحالة... S, P, D, F على التوافق : $\ell = 0$ توافق الحالات S ، و $\ell = 1$ توافق الحالات P و $\ell = 2$ توافق الحالات D ، . . . الخ . وأصل هذه التسميات هو علم الطيف البصري ، حيث كان يجري استخدام الحروف لتوصيف السلاسل الطيفية وفقاً لظهور الخطوط الطيفية :

($S \rightarrow$ sharp, $P \rightarrow$ principle, $D \rightarrow$ diffuse, $F \rightarrow$ fine)

3-9 الزخم الزاوي بشكل عام .

كنا نتناول حتى الآن ـ بالشكل الواضح ـ الزخم الزاوي فقط . ومن ناحية أخرى ، وجدنا أن الشكلانية القائمة على علاقات التبادل تسمح بقيم نصف صحيحة أو صحيحةللعدد ℓ : فالاقتصار على القيم الصحيحةلـ ℓ نتج عن الشكل الواضح للمؤثر وعن المطالبة بوحدانية قيمة الدالة الموجية . أما القيم نصف

الصحيحة ، فنجمت مباشرة عن علاقات التبادل التي تستجيب لها مركبات الزخم الزاوي . فاذا كانت العناصر الموافقة موجودة في الطبيعة ، سيعني ذلك أن المبادلات المعنية تمثل جانباً أكثر عمقاً في جوهر الزخم الزاوي مقارنة مع المعادلة (1—9) ومع الفرضية القائلة بوحدانية قيمة الدالة الموجية .

ولقد أثبتت التجربة أن هذه هي الحالة التي توجد فيها عناصر ، وضمن الواقع ، توافق القيم نصف الصحيحة لـ ℓ، والتي تم استثناؤها سابقاً ، وتُربَط هذه القيم بزخم البرم الزاوي الذي يحمله الجسيم . ويتضح من الشرح السابق أنه اذا تم القبول بهذا التعميم ، يتوجب ادخال احداثيات جديدة أيضاً . وإلا فإن المطالبة بوحدانية قيمة الدالة الموجية لن تُلبى . وتمثل الاحداثيات الجديدة درجات الحرية الداخلية لدى الجسيم .

أما بالنسبة لزخم البرم الزاوي ، فيتبين ، تجريبياً ، أن الأعداد الكمية يجب أن تتخذ إما قيماً صحيحة أو قيماً نصف صحيحة . ولقد تم اشتقاق العلاقات جميعاً ، والتي حصلنا عليها حتى الآن ـ كما أشير أعلاه ـ من المبادِلات . لذلك توصلنا الى النتيجة القاضية بأن الدالات ψ_{sm_s} ، والتي تمثل ـ في آن واحد ـ دالات مميزة لكلٍ من مربع زخم البرم الزاوي S^2 وللمركبة Z من البرم ، سوف تُعطى بالمعادلتين :

$$S^2\psi_{sm_s} = s(s+1)\hbar^2\psi_{sm_s}, \qquad (9-67)$$

$$S_z\psi_{sm_s} = m_s\hbar\psi_{sm_s}$$

حيث : s و m_s يمكن أن يتخذا إما قيماً صحيحة أو نصف صحيحة ، وذلك تبعاً لطبيعة البرم لدى الجسيم قيد البحث . وفي حالة النوى الذرية ، يجري الترميز لزخم البرم الزاوي ، عادة ، بالرمز I ، وعندئذ ، تكتب علاقات الزخم الزاوي النووي على الشكل (67—9) مع استبدال S^2 و S_z بـ I^2 و I_z وكذلك باستبدال S و m_s بـ I و m_I .

4—9 جمع الزخوم الزاويَّة

سوف ندرس ، في هذه الفقرة ، عملية جمع نوعين مختلفين من الزخم الزاوي ، هما : الزخم الزاوي المداري وزخم البرم الزاوي الخاصان بالالكترون .

ولكن العلاقات التي سنحصل عليها صالحة بالنسبة لأي نوعين من الزخوم الزاويّة .
ويمكن كتابة الزخم الزاوي الاجمالي للالكترون على شكل مجموع الزخمين الزاويين :
الزخم المداري وزخم البرم :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad (9-68)$$

حيث J يملك المركبات التالية :

$$J_x = L_x + S_x, \quad J_y = L_y + S_y, \quad J_z = L_z + S_z \qquad (9-69)$$

وتكون علاقات التبادل بالنسبة لـ J هي ذاتها تلك الخاصة بكل من L و S على حدة ، ولذا فإن J^2 و Jz يتبادلان ، وبالتالي فإن القيم المميزة والدالات المميزة المتزامنة هي :

$$\begin{aligned} J^2\psi_{jm_j} &= j(j+1)\hbar^2\psi_{jm_j}, \\ J_z\psi_{jm_j} &= m_j\hbar\psi_{jm_j} \end{aligned} \qquad (9-70)$$

حيث : $j \geq |m_j|$ وهو عدد موجب صحيح أو نصف صحيح ، وذلك تبعاً لكون S صحيحا أو نصف صحيح .

ويُعطى مربع الزخم الزاوي الاجمالي بالعلاقة التالية :

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \qquad (9-71)$$

ونظراً لأن المؤثرين L و S يؤثران في متغيرات مختلفة ، وبالتحديد في متغير الموضع ومتغير البرم ، فإن المؤثر المتجهي L يبادل كل المركبات الثلاث للمؤثر S وعليه فإن ،

$$[L^2, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}] = 0 \qquad (9-72)$$

وكذلك ، ونظراً للمبادلة بين فإن :

$$[L^2, J^2] = 0 \qquad (9-73)$$

و :

$$[S^2, J^2] = 0 \qquad (9-74)$$

وهكذا ، من الواضح أن المؤثرات الثلاثة J^2, L^2, S^2 يبادل أحدهما الآخر ، كما أنه واضح ، من شكل المؤثر J_z أنه يبادل L^2 و S^2 .

وبالتالي ، فإن المؤثرات الأربعة J^2, L^2, S^2, J_z يبادل أحدها الآخر ، والملحوظات الموافقة لها قابلة للقياس في آن واحد . ونظراً لاعتبارات ذكرناها سابقاً ، فإن S وL يبادل أحدهما الآخر ، وجملة المؤثرات L^2, L_z, S^2, S_z هي جملة مبادَلة أيضاً ، ولذا فإنه توجد هاتان الجملتان ـ على الأقل ـ كجملتين بديلتين من أربعة مؤثرات مبادلة هي مؤثرات الزخوم الزاويَّة التي يبادل أحدها الآخر .

ولكي ندرس القيم المميزة الممكنة لـ J^2 المرتبط بالجملة الأولى ، من الملائم أن ننظر أولاً الى الجملة الثانية ، أي إلى L^2, L_z, S^2, S_z . ولقد افترضنا أن ℓ وS معلومين ومثبتين . ويوجد عدد إجمالي قدره $(2l + 1) \cdot (2s + 1)$ من حالات التوجُّه الممكنة بالنسبة لـ m_ℓ وm_S ، بالنسبة لقيمتين مثبتتين من قيم ℓ وS . تظهر أكبر قيمة للمركبة Z من الزخم الاجمالي عندما يتخذ m_ℓ وm_S كلٌ قيمته الأعظمية ، وتعطى القيمة الأعظمية mj بالعلاقة التالية :

$$(m_j)_{\max} = l + s \qquad (9-75)$$

وتفترض هذه القيمة العظمى لـ $J_z = L_z + S_z$ أن (j) max يجب أيضاً أن تتخذ القيمة التالية :

$$(j)_{\max} = l + s \qquad (9-76)$$

وبالنسبة لقيمتين مثبتتين من قيم l و s ، يمكن أن تظهر هذه القيمة الأعظمية لـ m_j بطريقة واحدة وهي أن تكون القيمة المميزة $m\, j = j$ غير مفككة . أما القيمة التالية الأدنى للمركبة Z من الزخم الزاوي ، فتظهر عندما تعطى m_j بالعلاقة :

$$m_j = l + s - 1 \qquad (9-77)$$

لأنه ، وكما رأينا ، يمكن توليد الجملة الكاملة من حالات الزخم بوساطة مؤثري المرقاة اللذين يغيران المركبة Z من هذا الزخم بمقدار عدد صحيح . ويمكن أن تظهر الحالة الموافقة لـ $m_j = \ell + S - 1$ بطريقتين مختلفتين : إما بزيادة m_ℓ واحداً أو بنقصان m_S واحداً . وترتبط إحدى هاتين القيمتين m_j بالعدد الكمي j المعطى بالمعادلة (9—76) طالما أن اتجاهات البرم ، وعددها بالنسبة لقيمة j هذه يساوي $2j + 1$ ، جميعها ممكنة . لذلك يجب أن ترتبط القيمة الثانية بقيمة

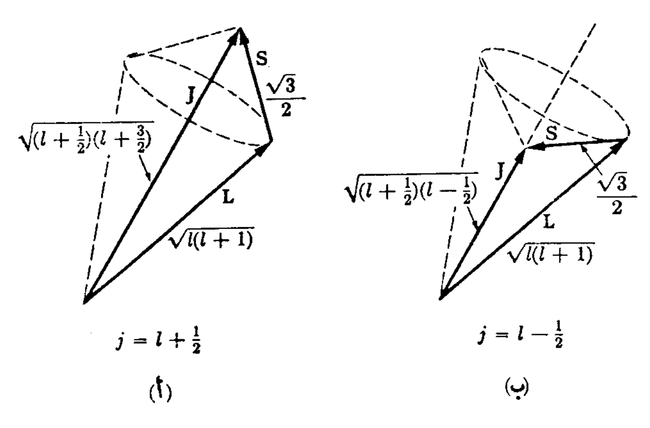
jالمعطاة بالعلاقة التالية :

$$j = l + s - 1 \qquad (9-78)$$

ومن الواضح أن هذه الحالة أيضاً حيث $J = m_j = \ell + S - 1$ ، هي حالة غير مفككة . ويمكن تكرار محاجة كهذه للبرهان على أن j يمكنها اتخاذ القيم كافة الواقعة بين حدَّي المتراجحة :

$$(l + s) \geq j \geq |l - s| \qquad (9-79)$$

وأن هناك $2j + 1$ حالة غير مفككة لأجل كل قيمة من قيم j وتوافق هذه الحالات الـ $2j + 1$ الاتجاهات الـ $2j + 1$ الممكن اتخاذها من قبل الزخم الزاوي بالنسبة لمحور التكمية (المحور Z).



الشكل 9-2 تمثيل بياني لجمع الزخم المداري L الى زخم البرم الزاوي S وذلك للحصول على الزخم الزاوي الاجمالي J في حالة $s = \frac{1}{2}, l \neq 0$. وتبدو هنا الحالتان : (أ) S موازٍ لـ L و (ب) S معاكس لـ L

ونظراً لأن هناك $2j + 1$ حالة ممكنة بالنسبة لكل j ، فإن العدد الاجمالي للاتجاهات الممكنة بالنسبة لمحصلة متجه الزخم الزاوي سيكون ـ إذا جمعنا أرقام كل هذه الحالات ـ مساوياً القيمة $(2\ell + 1) \times (2S + 1)$. وكنا قد حصلنا على هذه القيمة بالذات في السابق انطلاقاً من دراسة متجهَيْ الزخم الزاوي

اللذين يتخذان اتجاهاتهما بشكل مستقل . وتعطى بالنسبة لحالة البرم المساوي لـ $\frac{1}{2}$ ، القيم الممكنة بالنسبة لـ j كالآتي :

$$j = l + \tfrac{1}{2}, \quad j = l - \tfrac{1}{2}, \quad l \neq 0 \qquad (9-80)$$

ويمكن تبيان جمع الزخمين الزاويين في حالة البرم المساوي $\frac{1}{2}$، كما في الشكل (2-9) . فبمقدور المرء أن يتصور زخم البرم الزاوي إما « موازياً » أو « معاكساً » للزخم الزاوي المداري ، حيث يتخذ الاجمالي الناتج عن الجمع $(2j + 1)$ اتجاهاً بالنسبة لاتجاهٍ معين في الفراغ . ولكن ، ونظراً لتأثيرات التأرجح المتعلقة بمبدأ عدم التحديد والذي يؤدي الى متجه للبرم أكبر من $\frac{1}{2}\hbar$ (في حالة البرم المساوي النصف) والى متجه للزخم الزاوي المداري يزيد طوله على $l\hbar$ ، فإن جمع المتجهين يتم كما هو مبين في الشكل (2-9) .

5-9 صف المؤثرات T

من المفيد وأثناء دراسة المسائل المتعلقة بالزخم الزاوي ، أن نعرِّف صفاً من المؤثرات يتميز ، عموماً ، بعلاقات تبادل محددة . وتسمى هنا هذه الزمرة من المؤثرات « الصف T » للمؤثرات ؛ وهي تحقق المبادِلات التالية مع مؤثر للزخم الزاوي (J مثلاً):

$$\begin{aligned} [J_x, T_x] &= 0, \\ [J_x, T_y] &= i\hbar T_z, \\ [J_x, T_z] &= -i\hbar T_y \end{aligned} \qquad (9-81)$$

$$[\mathbf{J}, \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{T}_2] = 0 \qquad (9-82)$$

إن المتجهات r, p, j وأياً من منتوجات تقاطعها تدخل ضمن الصف T وفي الواقع فإن أي متجه يتغير مع دوران الاحداثيات مثلما يتغير r يدخل ضمن هذا الصف .

وكحالة خاصة من علاقات التبادل المعطاة بالمعادلة (82-9) ، نورد المعادلة التالية :

$$[\mathbf{J}, \mathbf{T}^2] = 0 \qquad (9-83)$$

ومن الملائم إدخال المؤثر :

$$T_+ = T_x + iT_y \qquad (9-84)$$

والذي يخضع لعلاقة التبادل التالية مع Jz:

$$[J_z, T_+] = \hbar T_+ \qquad (9-85)$$

ويمكن التأكد بشكل مباشر من أن هذا المؤثر يحقق كذلك علاقة التبادل :

$$[J^2, T_+] = 2\hbar[T_+J_z - T_zJ_+] + 2\hbar^2 T_+ \qquad (9-86)$$

إن مقارنة المعادلة (9-85) مع علاقة التبادل (9-14) تبين أن هذا المؤثر هو مؤثر المرقاة الذي يعمل على زيادة المركبة Z من الزخم الزاوي عندما يتم تطبيقه على الدالة الموجية . وعلاوة على ذلك ، يمكن التأكد ، بوساطة المعادلة (9-86) من أنه حين يؤثر + T في الدالة الموجية ، والتي تتميز بتساوي m و j ، فانه لا يؤدي فقط الى زيادة الدليل m واحدة ، بل كذلك الى زيادة الدليل j واحدة :

$$T_+\psi_{jj} \sim \psi_{j+1,j+1} \qquad (9-87)$$

ولأجل التأكد من ذلك سنأخذ العلاقة التالية :

$$J^2\psi_{jj} = j(j+1)\hbar^2\psi_{jj} \qquad (9-88)$$

ولنضرب الطرف الأيسر من هذه المعادلة بالمؤثر + T ، ونستخدم علاقة التبادل (86-9) لإعادة ترتيب الحدود . عندئذٍ يكون :

$$[J^2T_+ - 2\hbar(T_+J_z - T_zJ_+) - 2\hbar^2T_+]\psi_{jj} = j(j+1)\hbar^2T_+\psi_{jj} \qquad (9-89)$$

وبما أن :

$$J_+\psi_{jj} = 0 \qquad (9-90)$$

يمكن اختزال المعادلة (9-89) لتصبح :

$$J^2(T_+\psi_{jj}) = (j+1)(j+2)\hbar^2(T_+\psi_{jj}) \qquad (9-91)$$

ومن جهة أخرى ، وبالاستفادة من خاصية مؤثر المرقاة المعطاة بالمعادلة (9-85) ، وبضرب معادلة القيمة المميزة لـ Jz بالمؤثر + T ، نجد أن :

$$J_z(T_+\psi_{jj}) = (j+1)\hbar(T_+\psi_{jj}) \qquad (9-92)$$

نجد من هاتين المعادلتين الأخيرتين أن مفعول المؤثر + T ، وعند تطبيقه على الدالة الموجية التي تتميز بتساوي m_j و J يتجلى في زيادة الدليلين كليهما :

$$T_+\psi_{jj} = \text{constant} \cdot \psi_{j+1,j+1} \qquad (9-93)$$

وبالعودة الى المعادلة (83–9) ، يتضح أيضاً أن فعل مربع المؤثر T لايترك أثراً في الدليلين ، فالدالة الموجية تبقى دالة مميزة مشتركة لـ J^2 و Jzبالقيمة المميزة نفسها .

وكمثال واضح على فائدة المتجهات المنتمية الى الصف T . سنلاحظ أن التوافقيات الكروية يمكن توليدها بالطريقة التالية اذا استثنينا ضمان الاستنظام . فالمتجه r ينتمي الى الصف T ، وعليه فإن :

$$(x + iy) Y_{ll} = f(r) Y_{l+1,l+1} \qquad (9-94)$$

وبالتالي نجد أن :

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \text{const} \cdot (L_x - iL_y)^{l-m} \left(\frac{x + iy}{r}\right)^l \cdot 1 \qquad (9-95)$$

ويجب أن نلاحظ أنه عندما يفترض العدد 1 دالة تابعة لـ r فإنها دالة ذات دليلين مساويين الصفر $\ell = m = 0$

6–9 خلاصة .

عولج في هذا الفصل الزخم الزاوي واشتقاق القيم المميزة والدالات المميزة (المدارية) لمؤثرات الزخم الزاوي بوساطة التقنيات الجبرية قبل كل شيء . ولقد وجدنا أن تعريف مفهوم الزخم الزاوي في ميكانيك الكم أفضل عند ربطه بعلاقات تبادل محددة ، وقد رأينا أن ذلك كافٍ للحصول على القيم المميزة لمربع الزخم الزاوي أو لمركبات هذا الزخم منفردة . ويجب التأكيد على أن علاقات التبادل في المعادلات (4–9) هي خواص للزخم الزاوي ،**بشكل عام** ، وأن النتائج الناجمة عن علاقات التبادل هذه تتحقق بالنسبة لكل أنواع الزخم الزاوي . لذلك فإن المعادلات من (4–9) الى (28–9) ومن (30–9) الى (35–9) و(59–9) و (60–9) ومن (68–9) الى (80–9) جميعها تنطبق على الزخم الزاوي بشكل عام . (وانطلاقا من اعتبارات التناظر ، يجب أن تكون القيم المميزةلـ J_x وJ_z هي نفسها تلك التي حسبناها لأجل J_z) . ولقد بينا ألا المؤثرات المعنية تتبادل ، وأنه ـ بالتالي ـ يمكن قياسها في وقت واحد ، ولكن يمكن معرفة مركَّبة واحدة فقط من مركَّبات الزخم

الزاوي في وقت محدد . كما أوضحنا العلاقة بين الدالات الموجبة للزخم الزاوي والتوافقيات الكروية . ونوقش جمع زخمين زاويَّيْن وبُني نموذج متجهي بسيط لأجل هذا الجمع . وأخيراً تم تعريف الصف T للمؤثرات وإبراز بعض الخواص الشكلانية لمؤثرات هذا الصف .

مسائل

9–1 أ) ماهي معادلة القيمة المميزة لأجل طاقة دوَّام يتكون من كتلتين متساويتين نُقطيَّتَيْن كل منهما M ، ويفصل بينهما ـ بشكل صارم نسبياً ـ قضيب عديم الكتلة طوله d ؟ ب) ما هي القيم المميزة ؟ ج) ما هي الدالات المميزة ؟ (أهملْ تأثيرات الاهتزاز بما في ذلك احتكاك القضيب).

9–2 افترضْ أن نظاماً يتكون من جسيم واحد يملك زخماً زاوياً مدارياً مركبته Z تساوي $m\hbar$ ومربعه $\ell(\ell+1)\hbar^2$ أ) بيِّن أن $\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$ ب) بيِّن أن $\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2}{2}$ ج) بفرض أنه جرى قياس لمركبة الزخم التي تشكل زاويه مع المحور Z ، واحسب القيمة المتوسطة الناجمة عن القياس وكذلك القيمة المتوسطة لمعرفتها . د) بفرض أن $\ell = 1$ احسب احتمالات الحصول على القيم $m = \pm 1, 0$ لأجل هذه المركبة . هـ) بعد إجراء القياس المذكور ما هي احتمالية الحصول على النتيجة $m\hbar$ عند تكرار قياس L_z ؟ (توجيه : جرِّب ادخال المؤثرين $L_\pm = L_x \pm iL_y$

9–3 بغض النظر عن طراز مجال القوة المؤثر في جسيمين بيِّن أنه يمكن لأجل نظام يتكون من هذين الجسيمين القياس المتزامن لإحدى جملتين كل منهما تتضمن أربع كميات : L_1^2, L_2^2, L^2, L_z ; $L_1^2, L_{1z}, L_2^2, L_{2z}$ وأنه لا يمكن قياس كلتيهما .

9-4 يُرفق جداء المركبتين x و y من الزخم الزاوي لجسيم ما أثناء القياس بالمؤثر $\frac{1}{2}(L_xL_y + L_yL_x)$ أ) بينْ أن هذا المؤثر هرميتي . ب) احسب القيمة المتوسطة لهذا المؤثر في الحالة التي تتخذ فيها المركبة Z للزخم الزاوي القيمة $m\hbar$ ويتخذ مربعه القيمة $\ell(\ell+1)\hbar^2$. ج) احسب القيمة المتوسطة لهذا المؤثر (توجيه : عبِّر عن مؤثر الجداء بلغة المؤثرين ($L \pm$)

9–5 تساوي الدالة الموجية لجسيم كتلته m ، ويتحرك في بئر كمونية تساوي في لحظة زمنية محددة ما يلي :

$$\psi = (x + y + z) \exp(-\alpha\sqrt{x^2 + y^2 + z^2})$$

احسب احتمالية الحصول أثناء قياس كل من L^2 و Lz ، على القيمتين $2\hbar^2$ و O على التوافق .

6–9 ثمة مراقبان يراقبان النظام الذري نفسه ويتفقان على أن زخمه الزاوي $j = 1$ ويفترض كل واحد منهما أن مركبة الزخم الزاوي في الاتجاه الموافق لمحور التكمية الخاص به تساوي $+h$ أو O . أ) ناقش إمكان الجمع بين هذين الافتراضين . ب) بأي معنى يكون الرجلان كلاهما محقين أو غير محقين ؟ ج) في أية ظروف يكون كلا الرجلين على حق ؟

الفصل العاشر

القوى المركزية

10-1 السلوك الكيفي بوجود كمون مفاعل .

يعالج هذا الفصل المسائل التي تكون القوى المؤثرة في الجسيم فيها هي القوى المركزية فقط أي تلك القوى التي تكون طاقتها الكامنة دالة تابعة فقط للمسافة الشعاعية ما بين الجسيم وبداية الاحداثيات . وفي هذه الحالة يمكن كتابة مؤثر هاملتون كالآتي :

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + V(r) \qquad (10-1)$$

وبما أن r و P هما مؤثران من الصف T ، يتبين من المعادلة $(9-82)$ مؤثرات الزخم الزاوي L_x, L_y, L_z ، في حالة القوى المركزية ثلاثتها تُبادل مؤثر هاملتون ؛ وبالتالي ، فإن L^2 أيضاً يبادل مؤثر هاملتون وهكذا تشكل المؤثرات الثلاثة H, L^2, L_z جملة متبادِلة ، ومن الممكن اختيار الدالات الموجية بحيث تكون دالات مميزة مشتركة لهذه المؤثرات الثلاثة :

$$\psi_{Elm} = R_{Elm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad (10-2)$$

إن التبعية الزاوية لهذه الدالة الموجية هي التبعية الملائمة والوحيدة التي نربطها بالقِيم المميزة لـ L^2 و Lz ،وهي تُوصَف بالعددين الكميين ℓ و m . وباستخدام المعادلة $(9-42)$ للتعبير عن مؤثر الطاقة الحركية داخل مؤثر هاملتون $(10-1)$ يستطيع المرء أن يحصل على معادلة القيم المميزة للطاقة :

$$\left[\frac{1}{2m} P_r^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi_{Elm} = E\psi_{Elm} \qquad (10-3)$$

ولطالما أن ψ_{Elm} هي دالة ميزة للمؤثر L^2 ، فإن هذا يؤول الى :

$$\left[\frac{1}{2m} P_r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right] R_{El} = E R_{El} \qquad (10-4)$$

لنلاحظ أن R_{El} لا تتوقف على العدد الكمي m ، وهذه معادلة بالنسبة

للمتغير r فقط ، ويمكن جعلها متوافقة شكلياً مع مسألة الحركة وحيدة البعد وذلك بالاستفادة من التعويض التالي :

$$u_{El} \equiv rR_{El} \qquad (10-5)$$

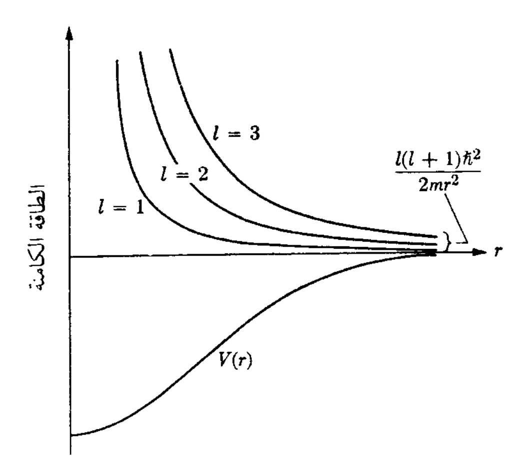
فبعد التعويض يكون لدينا :

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{d}{dr}\right)^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]u_{El} = Eu_{El} \qquad (10-6)$$

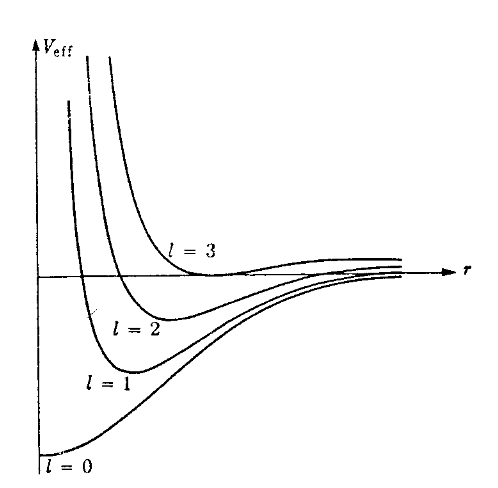
تتطابق هذه المعادلة من حيث الشكل مع المعادلة المعنية في المسألة وحيدة البعد (حركة في الاتجاه r). ولكنها معادلة ذات معنى فقط لأجل القيم الموجبة من r ، وبالعودة الى المعادلة (10−5) نجد أن الشرط التخومي الذي يجب أن تحققه الدالة u في النقطة $r = 0$ هو تلاشي u ، وإلا فإن الدالة الشعاعية R سوف تكون متباعدة في بداية الاحداثيات . والشرط الحدودي القاضي بأن تتلاشى u عندما $r = 0$ مكافىء للافتراض بأن الطاقة الكامنة يجب أن تكون لا نهائية في النقطة $r = 0$. بالتالي يمكن أن يُجعَل حل المعادلة (10−6) على توافق تام مع حل مسألة الحركة وحيدة البعد ، وذلك بأخذ طاقة كامنة تقفز الى اللانهاية في بداية الاحداثيات ، أو في حالة مغايرة ، باختيار شكل الحدين الثاني والثالث بين القوسين في الطرف الأيسر لتلبية الشرط ذاته .

ويبين الشكل (10−1) مظهر الحدين الثاني والثالث في يسار المعادلة (6−10) كلاً على حدة وذلك كدالة تابعة لـ r ، حيث افترضنا صيغة محددة من كمون مفاعل $V(r)$. وعلى الشكل (10−2) رسمنا مجموع الحدين ، وهو ما يمكن عده **الكمون الفعَّال** بالنسبة للحركة وحيدة البعد ، حيث يتكون من الطاقة الكامنة الحقيقية v(r) والطاقة الكامنة للقوة النابذة المركزية $l(l+1)\hbar^2/2mr^2$. أما مظهر الدالة الشعاعية u(r) (المرتبطة بالحركة في بئر كمونية يحدده الكمون الفعَّال V_{eff} المرسوم في الشكل (10−2) فهو مبيَّن في الشكل (10−3) . وهكذا ففي عدة أحوال يمكن الحصول على فكرة تقريبية عن شكل الدالة الموجية ، وذلك بمجرد مراقبة الشكل الذي تتخذه الدالة الكمونية المكافئة ، ويجب أن يكون هذا السلوك الكمي للدالة الموجية كافياً للاجابة عن السؤال الفيزيائي دون اجراء حسابات اذ ان حقيقة كون المرء يتعامل مع قوى مركزية تبسط

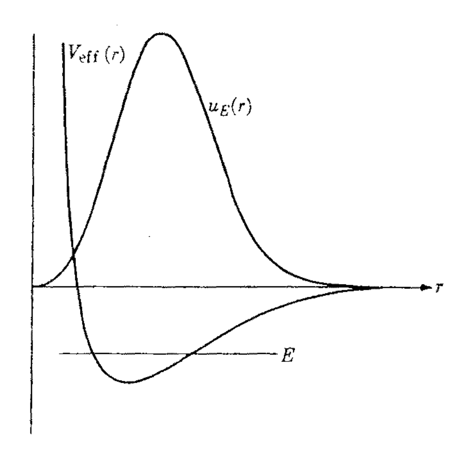
المسألة بدرجة بالغة .



الشكل 10–1 كمون شعاعي نموذجي $V(r)$ لقوة المفاعلة وكمونات نموذجية لـ « القوة النابذة المركزية » موافقة لعدة قيم من الزخم الزاوي كلها مرسومة كدالات للبعد الشعاعي عن مركز الكمون .



الشكل 10–2 « الكمونات الفعالة » للبئر الكمونية المعروضة في الشكل (10–1) متضمنة الحد النابذ المركزي الموافق لعدة قيم من الزخم الزاوي . ويجب أن نلاحظ أن تأثير الحد النابذ المركزي يختزل العمق الفعال للبئر الكمونية .



الشكل 10–3 الدالة الشعاعية المرتبطة بالبئر الكمونية الفعالة الموافقة للزخم الزاوي $l = 1$.

10–2 ذرة الهيدروجين.

سندرس ذرة الهيدروجين وذلك كمثال على المسألة التي يتسنى فيها الحساب الدقيق للدالة الشعاعية ، أو بشكل أكثر عمومية ، سندرس الذرة الهيدروجينية التي يمكن أن تكون شحنة النواة فيها مساوية أيَّ ضعف من أضعاف شحنة الالكترون . ويتخذ مؤثر هاملتون بالنسبة للذرة الهيدروجينية الشكل التالي :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\,\mathrm{p}^2 - \frac{Ze^2}{r} \qquad (10-7)$$

(هنا ، وعبر هذا الكتاب عموماً ، سنفترض أن شحنة الالكترون هي $-e$ ، وبالتالي فإن $e = 4.80 \times 10^{-10}$ واحدة كولومية ، وهي عدد موجب). ويبين الشكل (10–4) الطاقة الكامنة الفعالة V_{eff} للهيدروجين لأجل عدة قيم من ℓ . ويمكننا في ظل دالة كمونية من هذا الشكل ولأجل حالة الطاقة السالبة للجسيم الحصول فقط على حلول مقيدة ، كما سبق الحديث في الفصل الثالث . ويبين الشكل (10–5) الشكل المحتمل للدالة الموجية في حالة مقيدة .

وفي حالة الذرة الهيدروجينية تتخذ المعادلة (10–6) صيغتها التالية :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\,u - \frac{Ze^2}{r}\,u = Eu \qquad (10-8)$$

والتي يمكن تبسيطها باستخدام قياس جديد للطول :

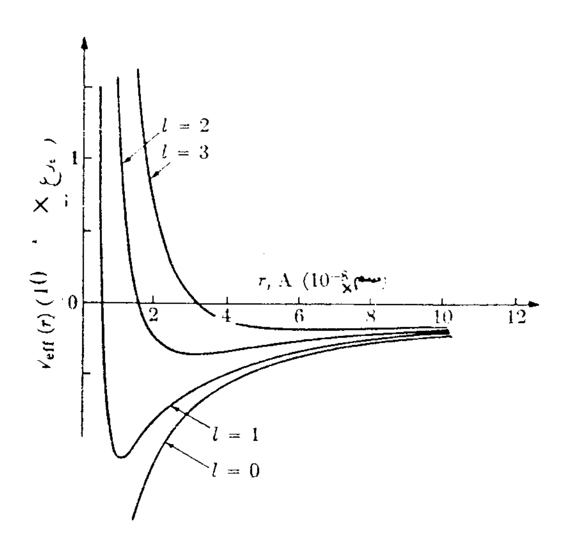
$$\rho \equiv \frac{\sqrt{8m|E|}}{\hbar} r \qquad (10-9)$$

وقياس جديد لطاقة الترابط التي يحملها الجسيم :

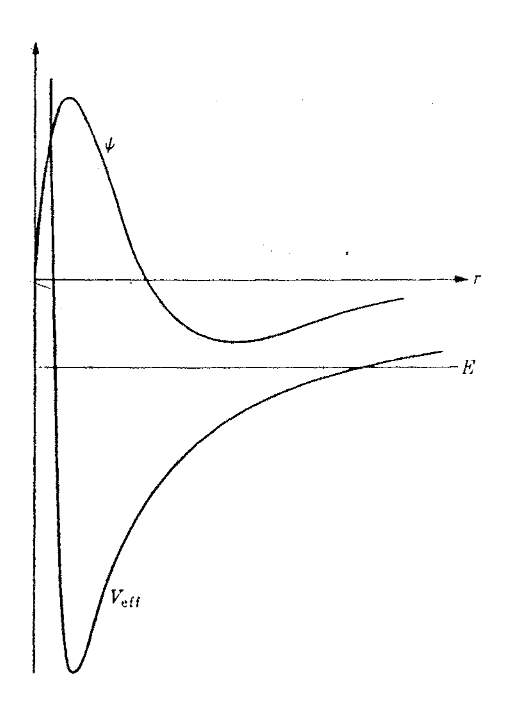
$$\lambda \equiv \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \cdot \frac{Ze^2}{\hbar} \qquad (10-10)$$

وبعد هذين التعويضين تؤول المعادلة . (10-8) الى :

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right) u = 0 \qquad (10-11)$$



الشكل 10-4 الطاقة الكامنة الفعالة V_{eff} للهيدروجين في ظل ء الكمي للزخم الزاوي ℓ .



الشكل 10−5 الدالة الموجية لحالة مقيدة محتملة بالنسبة للهيدروجين . وتوافق هذه الدالة الكمون الفعال في حالة 1 =ℓ المبيَّن في الشكل (10−4)

وكما أثناء النقاش حول المعادلة التفاضلية المتعلقة بالمتذبذب التوافقي البسيط ، لنأخذ السلوك المقارب للحل . فمن الواضح أن السلوك المقارب هو :

$$u \sim \exp\left(\pm \frac{\rho}{2}\right) \qquad (10-12)$$

حيث يجب أن تؤخذ إشارة « ناقص » لأن على u أن تكون نهائية في كل مكان . ومرة أخرى وبسبب طغيان التبعية الأسيِّة يمكننا ضرب الدالة الأسية بكثير حدود والحفاظ مع ذلك على السلوك المقارب ويعني ذلك أننا نبحث عن حل يكون نهائياً في كل مكان ومضروباً بالدالة الأسية (12−10) .

$$u = F \exp(-\tfrac{1}{2}\rho) \qquad (10-13)$$

واذا طبقنا هذا الافتراض تصبح المعادلة (10−11) كالآتي :

$$\frac{d^2F}{d\rho^2} - \frac{dF}{d\rho} + \left[\frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]F = 0 \qquad (10-14)$$

حيث :

$$F = \sum_{k=1}^{\infty} A_k \rho^k \qquad (10-15)$$

ويلبي هذا تلقائياً الشرط القاضي بأن تتلاشى F في النقطة P = O ؛ وبالتعويض في (10−14) ، ثم بجعل المعامِلات أمام قوى P المتشابهة مساويةً الصفر نحصل على العلاقات التالية :

$$l(l+1)A_1 = 0, \qquad (10-16)$$
$$(\lambda - 1)A_1 + [2 - l(l+1)]A_2 = 0$$

وعلى العلاقة التكرارية :

$$[k(k+1) - l(l+1)]A_{k+1} + (\lambda - k)A_k = 0, \qquad k \geq 2 \quad (10-17)$$

واذا كانت السلسلة (10−15) لا تنقطع أي اذا كانت لانهائية فان التناسب بين حدَّين متتاليين هو ، بناءً على المعادلة (10−17) كالتالي :

$$\frac{A_{k+1}}{A_k} = \frac{k - \lambda}{k(k+1) - l(l+1)}, \qquad k \geq 2 \qquad (10-18)$$

وتكون نهاية هذه النسبة ، وعندما تتزايد K بلا قيود ، هي :

$$\frac{A_{k+1}}{A_k} \xrightarrow[k\to\infty]{} \frac{1}{k+1} \qquad (10-19)$$

وهذه هي النسبة نفسها بين معاملَين متتاليين في سلسلة القوى الناجمة عن نشر الدالة exp P وعليه فإن السلسلة (10−15) لها سلوك مقارب هو exp P اذا كانت لا تنقطع . ومن الواضح ، عندئذ ، أنّ النتيجة تتلخص في أن u لها دالة مقاربة $\exp(\tfrac{1}{2}\rho)$ تخالف الشرط القاضي بأن تكون الدالة الموجية

نهائية في كل مكان . لذلك يجب على حل المعادلة (14—10) والذي يملك الشكل (15—10) ولكي يكون مقبولاً من وجهة النظر الفيزيائية ، أن يتضمن فقط عدداً نهائياً من الحدود .

وعندما تكون λ عدداً غير صحيح ، فمن الواضح ـ وعلى أساس علاقة التكرار (17—10) ـ أنه اذا كان أي من المعاملات A_k مغايراً للصفر ، فإن السلسلة لا يمكنها أن تنقطع إذإن K وℓ كليهما يجب أن يكونا عددين صحيحين ونظراً لذلك فان الحل الوحيد المقبول في ظل λ غير صحيحة هو الحل الصفر ، حيث $A_k = 0$ كلها ، أو $F = 0$. وبالتالي اذا أخذنا فقط القيم الصحيحة لـ λ ، يمكننا أن نبين وعلى نحو مماثل عدم وجود حلول مقبولة من وجهة النظر الفيزيائية لأجل $\lambda=0$ أو $\lambda=\ell$ ، مما يترك لنا حالة $\lambda=n$. حيث $n\neq\ell$ عدد صحيح ، وحيث يمكن ، وانطلاقاً من العلاقات (16—10) و (17—10) ، تبيان أن الشرط :

$$A_k = 0, \qquad k \leq l \tag{10—20}$$

يجب أن يتحقق . وينتج عن ذلك أن حالة $\lambda=n<\ell$ تقودنا الى حل على شكل سلسلة غير مقيدة ، ولذا يجب رفضه . أما الحالة :

$$\lambda = n > l \tag{10—21}$$

فتقود الى سلسلة منقطعة ، وهذا ما يمكن رؤيته من المعادلة (17—10) والتي تدل على أنه في هذه الحالة :

$$A_k = 0 \quad \text{عندما} \quad k \geq n+1 \tag{10—22}$$

وتكون كثيرات الحدود ، التي حصلنا عليها ، والتي يمكن ترميزها بدليلين هما n و ℓ على صلة وثيقة **بكثيرات حدود لا غيورّ المساعِدة** :

$$u_{ln} = \left(\sum_{k=l}^{n} A_k \rho^k\right) \exp\left(-\tfrac{1}{2}\rho\right) \tag{10—23}$$

واذا استخدمنا المعادلة (21—10) ، وبالاتحاد مع تعريف λ من المعادلة (10—10) نحصل على التعبير الخاص بحالات الطاقة المقيدة الممكنة بالنسبة لذرة الهيدروجين :

$$E_n = -\tfrac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2}, \qquad n > l \qquad (10-24)$$

حيث ان :

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \qquad (10-25)$$

ثابت معروف باسم **ثابت البنية الدقيقة** . ونرى أن الصيغة الخاصة بالقيم المميزة للطاقة لا تتضمن ℓ بمثابة مَعْلَم فهنالك عادةً أكثر من قيمة لـ ℓ في ظل طاقة معينة . وهذا التفكك عَرَضي وهو غير اعتيادي بالنسبة للكمون الكولومي .

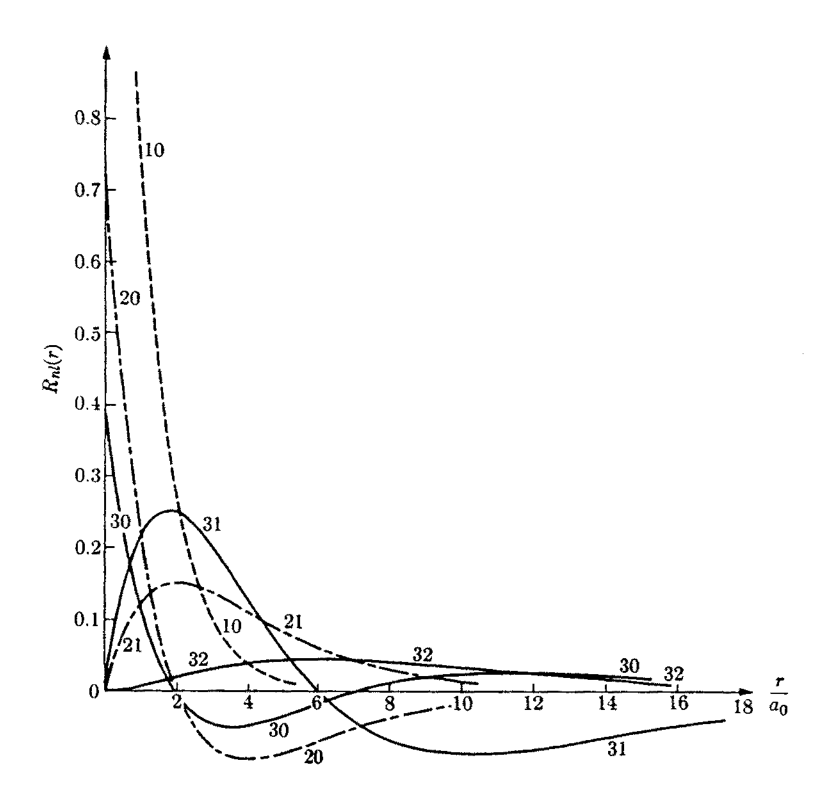
ونورد في الجدول (10-1) ثبتاً بعدد من الدالات الموجية الأكثر بساطة ، وهي مبينة في الشكل (10-6) . وقد أدخلنا في الصيغ الخاصة بهذه الدالات الترميز التالي :

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{me^2} \qquad (10-26)$$

وهذا هو **نصف قطر** بـور لأجل ذرة الهيدروجين . ويجب أن نلاحظ هنا أن كلاً من هذه الدالات تملك عدداً من العُقَد يساوي $n-\ell-1$.

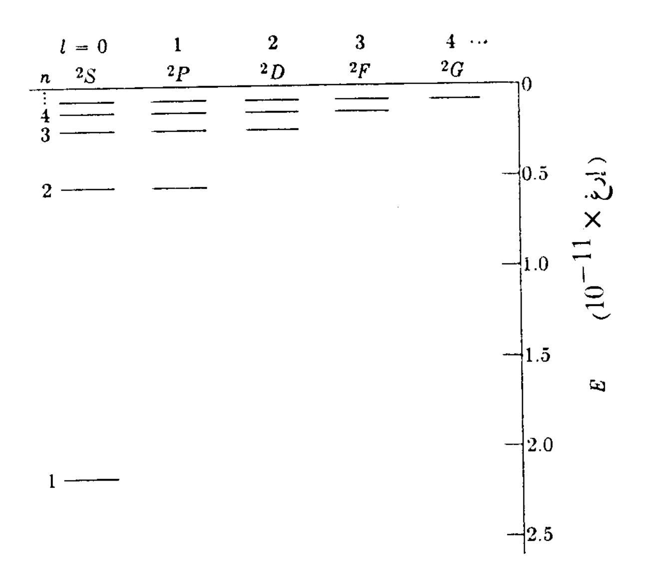
الجدول 10−1 عدة دالات موجية شعاعية لأجل ذرّات الهيدروجين

$R_{nl}(r) \equiv \frac{1}{r} u_{nl}$
$R_{10}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot 2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$
$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \cdot 2\left(1 - \frac{1}{2}\frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{Zr}{a_0}\right)$
$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{Zr}{a_0} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{Zr}{a_0}\right)$
$R_{30}(r) = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \cdot 2\left[1 - \frac{2}{3}\frac{Zr}{a_0} + \frac{2}{27}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] \exp\left(-\frac{1}{3}\frac{Zr}{a_0}\right)$
$R_{31}(r) = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \cdot \frac{4\sqrt{2}}{3}\frac{Zr}{a_0}\left(1 - \frac{1}{6}\frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{1}{3}\frac{Zr}{a_0}\right)$
$R_{32}(r) = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \cdot \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{1}{3}\frac{Zr}{a_0}\right)$



الشكل 10−6 الدالات الموجية الشعاعية R_{ne} (r) لأجل ذرات الهيدروجين ، وذلك عندما $n = 1, 2, 3$. ولقد وُسِمَ كلٌّ منحنٍ بعددين صحيحين يمثلانقيمتي n وℓالمعنيتين . ويجب أن نلاحظ أن تأثير القوة النابذة المركزية « يدفع » الدالة الموجية من مركز الذرة وأن لكل دالة $n-\ell-1$ عقدة .

نعرض في الشكل (10−7) مخطط مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين ، مع الأعداد الكمية الملائمة التي ترافق مختلف حالات الطاقة وفي أعلى الشكل أوردنا كذلك الترقيم الطيفي لمختلف المستويات .



الشكل 10-7 مخطط مستويات الطاقة لذرة الهيدروجين حيث يبين العدد الكمي الأساسي n في يسار الرسمة ويبدو الترميز الطيفي لمختلف الحدود في الأعلى . قارن هذه المستويات الطاقية مع الشكل (10-4) .

إن المعالجة التي قمنا بها أعلاه لذرة الهيدروجين قد بنيناها على افتراض ضمني هام يصلح أثناء الدراسة اللاحقة . فنحن عالجنا ذرة الهيدروجين وكأنها نظام وحيد الجسيم بحكم الافتراض الضمني للمعادلة (10-1) بأن الالكترون يتحرك حول مركز مفاعَلة مثبَّت . ونظراً لأن كتلة نواة الهيدروجين (البروتون) أكبر بكثير اذا ما قورنت بكتلة الالكترون ، فإن هذه المقارنة معقولة .

سندرس الآن التغيرات التي يتوجب إدخالها على الشرح السابق إذا لم نعد البروتون مجرد مركز للقوى يتحرك حوله الالكترون ، بل ـ عوضاً عن ذلك ـ عددناه عنصراً في نظام حركي من جسيمين . ويمكننا في هذه الحالة كتابة مؤثر هاملتون على الشكل التالي :

$$H = \frac{1}{2m_1} P_1^2 + \frac{1}{2m_2} P_2^2 - \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (10-27)$$

حيث يعود الدليل 1 للالكترون والدليل 2 للبروتون ، ويعطى مخرج الحد الخاص بالطاقة الكامنة بالتعريف :

$$r_{12} \equiv |r_1 - r_2| \qquad (10-28)$$

إنه من المفيد الاستعاضة عن متغيري الموضع r_1 وr_2 باحداثيات أخرى تصف مواضع الجسيمين ، ولذا سندخل مفهوم موضع الالكترون بالنسبة للبروتون (r)بالتعريف :

$$r \equiv r_1 - r_2 \qquad (10-29)$$

وسندخل الاحداثيات الخاصة بمركز كتلة النظام المكوّن من جسيمين :

$$R \equiv \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2} \qquad (10-30)$$

ويُعطى مؤثرا الزخم الموافقان بالمعادلتين التاليتين :

$$\mathbf{p} \equiv -i\hbar\nabla_r, \quad \mathbf{P} \equiv -i\hbar\nabla_R \qquad (10-31)$$

وسندخل بعد ذلك ترميزاً للكتلة الاجمالية والكتلة المختزلة للذرة :

$$M \equiv m_1 + m_2, \quad \mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \qquad (10-32)$$

وعند تعويض مختلف هذه المعادلات في مؤثر هاملتون $(10-27)$ نحصل على :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2M}\mathrm{P}^2 + \frac{1}{2\mu}\mathrm{p}^2 - \frac{e^2}{r} \qquad (10-33)$$

وتكمن أفضلية هذا التحويل في أن الزخم المرافق لحركة مركز الكتلة (والذي يساوي ، ببساطة ، الزخم الاجمالي الانتقالي للذرة) يتضمن الآن احداثيات مستقلة عن الطاقة الكامنة للذرة ، وبالتالي فإن مؤثر الزخم P يبادل مؤثر هاملتون :

$$[\mathrm{H}, \mathrm{P}] = 0 \qquad (10-34)$$

ويمكن تقسيم طاقة الذرة الى جزأين هما الطاقة الداخلية :

$$\mathrm{H}_0 \equiv \frac{1}{2\mu}\mathrm{p}^2 - \frac{e^2}{r} \qquad (10-35)$$

ويمثل الحد الأول في الطرف الأيمن من المعادلة (33-10) الطاقة المرافقة للحركة الانتقالية التي تقوم بها الذرة ككل . وبما أن مؤثر الزخم P في المعادلة (31-10) ومؤثر الطاقة الداخلية H_0 يبادل أحدهما الآخر يمكننا اختيار دالات موجية تكون دالات مميزة مشتركة لكليهما . ويكون المؤثر H_0 مطابقاً ، من حيث الشكل ، للمؤثر الذي درسناه من قبل في مسألة ذرة الهيدروجين ، وذلك حين تجاهلنا خواص البروتون ونظرنا إليه كمجرد مركز قوة ليس إلا . وبالتالي فان حل معادلة القيم المميزة سيكون مطابقاً للحل السابق مع وجود فارق واحد هو أن كتلة الالكترون استبدلت هنا بالكتلة المختزلة للذرة . وتتمتع الدالة الموجية ، والتي هي دالة مميزة في الوقت ذاته للطاقة الانتقالية للذرة ولطاقتها الداخلية بالشكل التالي :

$$\psi = \exp\left(\frac{iP \cdot R}{\hbar}\right) u_{n l m_l}(r) \qquad (10-36)$$

وتمثل القيمة المميزة للطاقة التي تحملها هذه الدالة الموجية وهذا من السهل رؤيته الطاقة الانتقالية للذرة مضافاً إليها طاقتها الداخلية والتي تملك الشكل التالي :

$$E_n = -\tfrac{1}{2}\mu c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2} \qquad (10-37)$$

لقد تم التأكد من صحة هذه الصيغة المحددة للطاقة الداخلية وذلك بالمقارنة بين أطياف الهيدروجين والدوتريوم والترتيوم ، إذ إن كتلتها المختزلة تختلف على نحو قابل للقياس .

3-10 المتذبذب ثلاثي الأبعاد .

سوف ندرس هنا المتذبذب ثلاثي الأبعاد واللااتجاهي ، وذلك كمثال ثانٍ على المسألة التي اصطدمنا بها في حالة حركة الجسيم تحت تأثير القوى المركزية . ويمكن في هذه الحالة كتابة مؤثر هاملتون بالشكل التالي :

$$H = \frac{1}{2\mu} P^2 + \tfrac{1}{2} k r^2 \qquad (10-38)$$

ويملك المرء هنا حرية اختيار الدالات المميزة ، بحيث تكون دالات مميزة مشتركة لكل من H و L^2 و Lz ، وذلك بسبب وجود القوة المركزية التي يتحرك الجسيم تحت تأثيرها ، أو ـ بدلاً عن ذلك ـ بحيث تكون دالات مميزة مشتركة للمؤثرات المتبادِلة Hx و Hy و Hz ، والتي نعرِّفها عبر العلاقة التالية :

$$H_x \equiv \frac{1}{2\mu} P_x^2 + \tfrac{1}{2}kx^2 \qquad (10-39)$$

والخ . وبهذا الشكل يمكن التعبير عن مؤثر هاملتون كما يلي :

$$H = H_x + H_y + H_z \qquad (10-40)$$

وبما أن H_x و H_y و H_z تتبادل ، وكل منها يؤثر في متغير مستقل فاننا نستطيع كتابة الدالات الموجية بالشكل التالي :

$$\psi_{qrs} = \psi_q(x)\psi_r(y)\psi_s(z) \qquad (10-41)$$

حيث :

$$\begin{aligned} H_x\psi_q(x) &= (q + \tfrac{1}{2})\hbar\omega\psi_q(x), \\ H_y\psi_r(y) &= (r + \tfrac{1}{2})\hbar\omega\psi_r(y), \\ H_z\psi_s(z) &= (s + \tfrac{1}{2})\hbar\omega\psi_s(z) \end{aligned} \qquad (10-42)$$

وذلك بناء على المناقشة السابقة للمتذبذب وحيد البعد (الفصل الثالث). وترتبط الأعداد الكمية q و r و s هنا بحركة الجسيم في الاتجاهات X و Y و Z على التوافق ، ومن الواضح أن الدالة المميزة المشتركة في المعادلة (10−41) هي دالة مميزة لمؤثر هاملتون H ، وتبدو معادلة القيمة المميزة على الشكل التالي :

$$H\psi_{qrs} = (q + r + s + \tfrac{3}{2})\hbar\omega\psi_{qrs} = (n + \tfrac{3}{2})\hbar\omega\psi_{qrs} \qquad (10-43)$$

يكمن السبب الداعي لدراسة هذه الجملة من الدالات المميزة المشتركة في الرغبة في حساب درجة التفكك في مختلف الحالات الطاقية للمتذبذب ثلاثي الأبعاد . ويجب أن نلاحظ أنه يمكن الحصول على الحالة الأساسية حيث $n = 0$ ، بطريقة واحدة فقط تكمن في جعل q و r و s جميعها تساوي الصفر . ومن ناحية ثانية يكمن تحقيق الحالة المهيَّجة الأولى $(n = 1)$ بجعل أحد الأعداد q أو r أو s مساوياً الواحد ، وجعل الاثنين الآخرين مساويين الصفر ، أي أن هناك ثلاث طرائق لحدوث ذلك ، وبالتالي فإن درجة تفكك الحالة $n = 1$ هي ثلاث درجات وبطريقة مماثلة يمكن للمرء أن يحسب درجات التفكك في حالات الطاقة الأخرى بالنسبة للمتذبذب ثلاثي الأبعاد ، مما سيسفر عن النتائج المعطاة في الجدول . (10−2)

الجدول 2–10

درجات تفكك الحالات الطاقية للمتذبذب ثلاثي الأبعاد

درجة التفكك	الحالة الطاقية
1	$n = 0$
3	$n = 1$
6	$n = 2$
10	$n = 3$
⋮	⋮

يكمن أحد الأسباب التي تجعل من المناسب معرفة درجات التفكك لدى المتذبذب ثلاثي الأبعاد في أنه عند معالجة المسألة المتعلقة بتحديد الحالات الذاتية المتزامنة للمؤثرات L^2 و H و L_z يكون مفيداً امتلاك معيار لتحديد ما إذا كانت جملة الدالات الموجية جملة تامة ولنختر في ظل هذه الجملة الجديدة من الملحوظات المتبادلة جملة جديدة من الدالات المميزة المرسومة بالدليل n للطاقة والدليل ℓ للزخم الزاوي الاجمالي والدليل m للمركبة Z من الزخم الزاوي وعندئذٍ يجب أن تكون معادلة القيمة المميزة للطاقة كالآتي :

$$H\psi_{nlm} = (n + \tfrac{3}{2})\hbar\omega\psi_{nlm} \qquad (10-44)$$

ومن المرغوب فيه وبشكل واضح إيجاد مؤثر المرقاة الذي من شأنه ليس فقط توليد الحالات الموافقة لمختلف الطاقات بل وكذلك توليد حالات الزخوم الزاوية المختلفة . ولذا فاننا نقوم بادخال المؤثر المتجهي R الذي يعرَّف ب :

$$R \equiv \frac{1}{\sqrt{2\mu}}P + i\sqrt{\frac{k}{2}}\,r \qquad (10-45)$$

وتبين المقارنة مع المعادلة (6–74) أن كل واحدة من مركّبات هذا المتجه هي مؤثر مرقاة يصلح لتوليد الحالات الطاقية الأعلى من الحالات الطاقية الأدنى : ففي كل مرة يتم فيها تطبيقه على الدالة الموجية نحصل على دالة موجية جديدة توافق طاقة

أعلى . وبما أن المتجه R المعرَّف في المعادلة (10−45) هو تركيب خطي لمتجهين ينتميان الى الصف T فهو أيضاً متجه من الصف Tوبالتالي يمكننا تعريف المؤثر + R كما يلي :

$$R_+ \equiv R_x + iR_y \qquad (10-46)$$

والذي سيكون بمثابة مؤثر مرقاة لتوليد حالات زخم زاوي أعلى من الحالات الأدنى وبناء على المعادلة (6−79) يلبي المؤثر + R علاقة المبادلة مع مؤثر هاملتون حيث :

$$[H, R_+] = \hbar\omega R_+ \qquad (10-47)$$

وبما أن الحالة الطاقية الأدنى للمتذبذب ثلاثي الأبعاد ليست مفككة ، فبالامكان كتابتها مباشرة وكما في المعادلة (10−41) كمجرد جداء الدالات الموجية الثلاث الموافقة للحالة الأدنى للمتذبذب التوافقي البسيط في الاتجاهات x و y و z وهي وحين تكون مستنظمة على الواحدة تبدو كما يلي :

$$\psi_{000} = \left(\frac{k}{\pi\hbar\omega}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{kr^2}{\hbar\omega}\right) \qquad (10-48)$$

ويفضي التأثير في هذه الدالة الموجية S مرة وبوساطة المؤثر + R الى المعادلة التالية :

$$R_+^s\psi_{000} = \psi_{sss} \qquad (10-49)$$

حيث خواص المرقاة لدى المؤثر + R وباتجاه ازدياد كل من الطاقة والزخم الزاوي تسفر عن زيادة واحد لكل من الدلائل الثلاثة .

ومن ناحية أخرى عن المعادلة (9−83) أن المؤثر R^2 الذي نحصل عليه بتربيع (10−45) لايغير القيم المميزة الموافقة للمؤثرين L^2 و Lzأثناء تطبيقه على الدالة الموجية المشتركة لهذين المؤثرين بل يغير الطاقة وحسب وهكذا فانه مؤثر مرقاة لزيادة الطاقة الموافقة لحالة ما دون تغيير الزخم الزاوي وبما أن المؤثر R نفسه يزيد الطاقة واحداً فإن المؤثر R^2يزيدها اثنين : فحين يجري التطبيق التكراري لهذا المؤثر على الدالة الموجية (10−48) ، تكون النتيجة :

$$(R^2)^s\psi_{000} = \psi_{2s,0,0} \qquad (10-50)$$

من الواضح ، أنه بإمكان المرء ، إذا ما طُبِّق أولاً المؤثر R^2 ، ومن ثم المؤثر $R+$. وأخيراً مؤثر المرقاة للزخم الزاوية المداري $L-$ أن يحصل على تعبير عام للدالة الموجية التي ستكون دالة مميزة مشتركة للمؤثرات H و L^2 وL_z :

$$\psi_{nlm} = L_-^{l-m} R_+^l (R^2)^{(n-l)/2} \psi_{000} \qquad (10-51)$$

بما أن قوة R^2 يجب أن تكون عدداً صحيحاً فعلى n وℓ أن يكونا كلاهما شفعيين أو وتريين وأن يكون $n \geq \ell$.

لم نبذل في سياق الشكلانية المصاغة أعلاه محاولاتٍ لضمان الاستنظام للدالة الموجية ولذا فإن المعادلة (51−10) ليست مستنظمة كما يجب عليها أن تكون . ومن ناحية ثانية من السهل حساب الثابت الملائم والذي يلزم لضرب المعادلة (51−10) به وجعل الدالة الموجية مستنظمة على الواحدة اذا ما استخدمنا تقنيات مماثلة جداً لتلك التي استخدمناها في الفصل التاسع . وتمثل المعادلة (51−10) جملة من الدالات التي تشكل دالات مميزة مشتركة للمؤثرات الثلاثة H و L^2 و Lz ولكن تبقى مع ذلك احتمالية أن تكون جملة الدالات هذه ليست تامة . وللتأكد من ذلك سنحسب درجة التفكك لكل واحدة من الحالات الذاتية للطاقة وذلك كما هي مبنية في الجدول (3−10) ومن الواضح للعيان وبمقارنة الجدولين (3−10) و (2−10) أن درجات التفكك هي ذاتها . وعليه فان جملة الدالات المميزة المعطاة بالمعادلة(51−10) هي جملة تامة .

الجدول 10–3

درجات التفكك في الحالات الذاتية لطاقة المتذبذب ثلاثي الأبعاد

درجة التفكك	الحالات الذاتية للطاقة		
1	$n = 0$	$l = 0$	$m = 0$
3	$n = 1$	$l = 1$	$m = 1, 0, -1$
6	$n = 2$	$l = 0, 2$	$m = 0; 2, 1, 0, -1, -2$
10	$n = 3$	$l = 1, 3$	$m = 1, 0, -1; 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3$
⋮	⋮	⋮	⋮

10–4 الجُسَيْم الحر .

كنا نناقش حتى الآن مسألة الجسيم الحر بلغة الحركة التي يتم توصيفها بوساطة موجة مستوية في الوقت الذي تكون فيه كلٌ من طاقة الجسيم وزخمه الخطي محددين بشكل جيد أي معروفين وكانت الموجة المستوية تؤخذ كحالة ذاتية مشتركة لمؤثر هاملتون ولمؤثر الزخم الخطي الخاصين بالجسيم . وعلى صعيد آخر يمكن النظر الى الجسيم الحر بوصفه جسيماً يتحرك ضمن مجال قوة مركزي في الحالة البدهية التي تكون القوى فيها غائبة كلياً . وعليه فإن كلاًّ من مؤثر هاملتون H والمؤثرين L^2 و Lz تشكل ثلاثة مؤثرات متبادلة في آن واحد ، ومن الممكن اختيار الدالات المميزة بحيث تكون دالات مميزة مشتركة لهذه المؤثرات الثلاثة ولا يمكن لمثل هذه الجملة من الدالات أن تكون أمواجاً مستوية طالما أن مؤثر الزخم الخطي لا يبادل مؤثر الزخم الزاوي . وتبدو المعادلات الخاصة بالقيم المميزة للطاقة والزخم الزاوي الاجمالي والمركبة Z من هذا الزخم كالآتي :

$$H\psi_{klm} = E\psi_{klm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\psi_{klm}$$

$$L^2\psi_{klm} = l(l+1)\hbar^2\psi_{klm} \qquad (10-52)$$

$$L_z\psi_{klm} = m\hbar\psi_{klm}$$

واذا استخدمنا التعريف :

$$\psi \equiv \frac{1}{r}u \qquad (10-53)$$

فإن المعادلة الشعاعية للجسيم الحر في حالة $\ell=0$ تأخذ الشكل التالي :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}u = 0 \qquad (10-54)$$

وهذه معادلة تفاضلية بسيطة يمكن حلها لتعطي الدالة :

$$\psi_{k00} = \frac{\sin kr}{kr} \qquad (10-55)$$

وهذه الدالة غير مستنظمة ولاهي قابلة للاستنظام .

وبدلاً من معالجة المعادلة التفاضلية الشعاعية لأجل حالات أخرى غير $\ell=0$ ،بامكاننا إيجاد طريقة لتوليد الدالات الموجية الأخرى كافة انطلاقاً من الحالة $\ell=0$ المعطاة بالمعادلة (10−55) . وينتمي مؤثر الزخم P الى صف المؤثرات المتجهية T ، ولذا فاننا سنُدخل المؤثر + P

$$P_+ \equiv P_x + iP_y \qquad (10-56)$$

وهو مجموع بسيط لاثنتين من مركبات الزخم الخطي للجسيم لذلك فإن + P يبادل مؤثر هاملتون وبناءًعليه ستبقى الدالة الموجية بمثابة دالة مميزة للطاقة لها الطاقة نفسها وبعد أن يؤثر فيها + P . وعلى صعيد آخر ، ينتج من المعادلة (9−87) أن مفعول المؤثر + P ، وبالنسبة للدالة الموجية في الحالة $\ell=m$ هو زيادة لكل من ℓ وm واحداً . وبالتالي فإن تأثير + P في الدالة الموجية (10−55) يجب أن يولد الدالة الموجية التالية :

$$P_+\psi_{k00} \sim \psi_{k11} \qquad (10-57)$$

ويمكن تكرار هذا الاجراء ℓ مرة للحصول على الدالة الموجية :

$$P_+^l\psi_{k00} \sim \psi_{kil} \qquad (10-58)$$

وبالاستفادة من مؤثر المرقاة الخاص بالزخم الزاوي يمكن للمرء عندئذ توليد الدالة الموجية في حالتها العامة ذات الأعداد الكمية k و ℓ و m وبالنسبة للجسيم الحر وهذه الدالة هي :

$$L_-^{l-m}P_+^l\psi_{k00} \sim \psi_{klm} \qquad (10-59)$$

لكي نرى بتفصيل أكثر نوعاً ما ، مفعول التأثير على الدالة الموجية بواسطة مؤثر طراز +P ، سندرس تأثيره على دالة عامة لـ r :

$$P_+f(r) = -i\hbar\left(\frac{x+iy}{r}\right)\frac{d}{dr}f(r) \qquad (10-60)$$

واعتماداً على نتيجة المسألة (10−7) (انظر نهاية الفصل)، يمكن تكرار هذه العملية حتى نحصل على :

$$P_+^l f(r) = (-i\hbar)^l(x+iy)^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l f(r) \qquad (10-61)$$

وبعد غض النظر عن ثابت التناسب ، نستطيع كتابة هذه المعادلة على النحو التالي :

$$P_+^l f(r) \sim Y_{ll}r^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l f(r) \qquad (10-62)$$

ومن هنا ، ومن المعادلتين (10−55) و (10−58) ،، يمكن أن نكتب الدالة الشعاعية للجسيم الحر على الشكل التالي :

$$R_{kl}(r) \equiv j_l(kr) = (-1)^l\left(\frac{r}{k}\right)^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l\left(\frac{\sin kr}{kr}\right) \qquad (10-63)$$

وليست هذه الدالة الشعاعية سوى دالة بسل الكروية ، وسوف تناقش هذه الدالات في الفصل السادس عشر بالتفصيل ، وتنتج الدالة الموجية للجسيم الحر عن جداء هذه الدالة الشعاعية والتوافقية الكروية :

$$\psi_{klm} = Y_{lm}(\theta, \phi) R_{kl}(r) \qquad (10-64)$$

5-10 التماثل .

كانت المؤثرات التي تعرضت للدراسة فيما سبق مرتبطة بكميات فيزيائية معروفة جيداً ، ولها مدلولها في الفيزياء الحجمية . ولكن هنالك مؤثرات لا تتوافق مع ملحوظات فيزيائية معروفة في الفيزياء الحجمية . فمثلاً ، وجدنا أن الدالات الموجية للمتذبذب التوافقي البسيط يمكن تبويبها سلفاً بصفتها إما شفعية وإما وترية . وكان بمقدورنا إدخال مؤثر له صفة أنه حين يؤثر في دالة شفعية يسفر عن قيمة مميزة هي 1 ، وحين يؤثر في دالة وترية يسفر عن قيمة مميزة هي 1 − . ويجب تخيل مثل هذا المؤثر وكأنه ـ بمعنى ما ـ يوافق شيئاً قابلاً للقياس فيزيائياً ، وأن هذا الشيء معطى في هذه الحالة الجزئية عبر طاقة الجسيم بطريقة وحيدة . وهناك ، في الحقيقة ، الكثير من المؤثرات التي يمكن ربطها بأشياء قابلة للقياس فيزيائياً على المستوى الذري ، ولكنها لاتملك قرائن لها في الفيزياء الكلاسيكية الحجمية . وأحد هذه المؤثرات هو مؤثر **التماثل** ، والذي يتميز بالخاصية التالية :

$$P\psi = \psi(-r_1, -r_2, \ldots) \qquad (10-65)$$

وتحديداً ، بكونه يؤثر في الدالة محيلاً كل واحد من متغيرات الموضع الى سالبِهِ . وبهذا تكون معادلة القيمة المميزة لمؤثر التماثل هي :

$$P\psi = \gamma\psi \qquad (10-66)$$

واذا أثرنا في هذه المعادلة بمؤثر التماثل من جديد نحصل على :

$$P^2\psi = \gamma^2\psi \qquad (10-67)$$

ومن ناحية أخرى ، يبدو من المعادلة (65−10) واضحاً أنه اذا ما طبقنا مؤثر التماثل على الدالة مرتين ، فإنها تعود لتكون هي ذاتها الأصلية ، وبالتالي ، فإن مربع مؤثر التماثل يجب أن يكون مؤثر تطابق

$$P^2 \equiv I \qquad (10-68)$$

حيث :

$$I\psi = 1 \cdot \psi \qquad (10-69)$$

ولذا يجب أن يكون γ^2 مساوياًالواحد ويجب أن تساوي γ أحد جذري الواحد :

$$\gamma = \pm 1 \qquad (10-70)$$

تُسمى الدالة المميزة الموافقة للقيمة المميزة 1+ ، وبالنسبة لمؤثر التماثل ، **دالة شفعية التماثل** ، بينما تسمى الدالة الموافقة للقيمة المميزة 1 − ، **دالة وترية التماثل** . وحين تكون الدالة الموجية شفعية التماثل يسمى النظام نظاماً في **حالة التماثل الشفعي** ، في حين يسمى النظام ، وعندما تكون الدالة وترية التماثل ، نظاماً في **حالة التماثل الوتري** .

واذ لم يكن هنالك قوى خارجية تؤثر في نظام من الجسيمات ، فإن الطاقة الكامنة تكون عندئذ دالة تابعة فقط لمواضع الجسيمات بالنسبة لبعضها بعضاً . واذا كانت الطاقة الكامنة ، علاوة على ذلك ، دالة تابعة فقط للمسافة بين الجسيمات ، فإن مؤثر هاملتون يمكن أن يكتب على الشكل التالي :

$$H = \sum_{ij} \frac{1}{2m_j} P_j^2 + V(r_{ij}) \qquad (10-71)$$

حيث :

$$r_{ij} = |r_i - r_j| \qquad (10-72)$$

وإنه لمن السهل رؤية أن مؤثر هاملتون من الطراز $(10-71)$ ومؤثر التماثل يتبادلان :

$$[H, P] = 0 \qquad (10-73)$$

كما أن من السهل أيضاً رؤية أن مؤثر التماثل هرميتي ، وبوساطة اختيارنا لدالات مميزة مشتركة ، ولأجل مؤثري هاملتون والتماثل ، نستطيع توصيف شتى الحالات ذات الطاقة المختلفة بوساطة تماثلها . وكذلك ، وطالما أن الدالة الموجية لأجل الحالة شفعية التماثل تختلف كثيراً عنها في الحالة وترية التماثل ، سيكون مجرد مصادفة ان تتميز حالتا

التماثل المختلف بقيمة الطاقة نفسها .

يوجد مثال على هذه المصادفة النادرة ، وهو يظهر في حالة ذرة الهيدروجين ، حيث إن الحالات الطاقية ... $n = 2, 3, 4,$ هي حالات مفككة وتحتوي على مركبات ذات تماثل مختلف (ولكن حين نأخذ بالحسبان التأثيرات النسبية ، يختفي التفكك) فالحالات التي يكون ℓ فيها شفعياً ، تكون شفعية التماثل ، والحالات التي يكون ℓ فيها وترياً ، هي حالات وترية التماثل . وهنالك أيضاً أمثلة كثيرة على جزيئات ذات حالات مختلفة التماثل قريبة جداً إحداهما من الأخرى (أي الحالات الطاقية)، ولكنها - اذا ما تحدثنا بصرامة - غير متطابقة . فحين تؤخذ بالحسبان المفاعَلات الأكثر تعقيداً مع المجال الكهرمغنطيسي ، يكون للهيدروجين حالات محددة التماثل . وبالنسبة لنظام معقد ، نجد أن الزخم الزاوي الاجمالي والمركبة Z من هذا الزخم وكذلك مؤثر التماثل ومؤثر هاملتون ، كلها ملحوظات متبادلة ويمكن قياسها في آن واحد ، ولكن شريطة أن يكون مؤثر هاملتون من الطراز المعطى بالمعادلة (10—71) .

إن أحد الأمثلة الهامة على تطبيق مفهوم التماثل هو تطبيقه على حالات الطاقة النووية * . فهذه الحالات يمكن تشخيصها بتوصيف قيم الطاقة والزخم الزاوي والتماثل ، ومن الهام أن نلاحظ أن التماثل كمية مفيدة - وفي بعض الحالات قابلة للقياس - أثناء توصيف الحالات النووية ، بما فيها تلك التي تكون الدالات الموجية للنواة غير معروفة فيها .

وكمثال إضافي على تطبيق مفهوم التماثل ، سندرس عزم ثنائي القطب الكهربائي المرتبط بمجموعة جسيمات . فمؤثر العزم المذكور لأجل نظام من الجسيمات يمكن كتابته على النحو التالي :

$$\mathbf{M} = \sum_j q_j r_j \qquad (10-74)$$

حيث : q_j— يشير الى شحنة الجسيم رقم J في النظام ، وحيث تشمل عملية

---

* أهمية مفهوم التماثل في الفيزياء النووية تناقش في كتاب :

(*) J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1952.

الجمع جسيمات النظام كافة . وإن عزم ثنائي الأقطاب هذا له قيمة متوقعة تساوي الصفر ، وذلك اذا جرى حسابها بالنسبة لحالة ذات تماثل محدد ، وهذا الأمر ينتج من كون المتجه M يغير إشارته عند عكس الاحداثيات جميعاً :

$$\langle M\rangle_{\pm} = (\psi_{\pm}, \mathbf{M}\psi_{\pm}) = (\mathrm{P}\psi_{\pm}, \mathbf{M}\mathrm{P}\psi_{\pm}) \qquad (10-75)$$

وبما أن P مؤثر هرميتي ، فإن :

$$\langle M\rangle_{\pm} = (\psi_{\pm}, \mathrm{PMP}\psi_{\pm}) \qquad (10-76)$$

وبما أن :

$$\mathrm{PM} = -\mathrm{MP} \qquad (10-77)$$

يمكن كتابة :

$$\langle M\rangle_{\pm} = -(\psi_{\pm}, \mathrm{MP}^2\psi_{\pm}) = -(\psi_{\pm}, \mathbf{M}\psi_{\pm}) = -\langle M\rangle_{\pm} \qquad (10-78)$$

وبالتالي فإن :

$$\langle M\rangle_{\pm} = 0 \qquad (10-79)$$

إن تلاشي القيمة المتوقعة لعزم ثنائي القطب الكهربائي ، وفي حالة مجموعة من الجسيمات ، يمكن تفسيره على أن القيمة المتوسطة لهذا العزم تساوي الصفر ، وذلك عندما تكون الجسيمات في حالة ذات طاقة محددة (وبناءً عليه ، ذات تماثل محدد اذا نحن استندنا الى ما ورد أعلاه)، وذلك بفرض أنه لايوجد ـ طبعاً ـ تفكك عرضي لحالات الطاقة ذات التماثل المختلف .

إن المسائل التي يثيرها عدم حفظ التماثل في الاضمحلال بيتًا β تخرج عن نطاق هذا النص ، وقد تجاهلناها عمداً .

10-5 خلاصة .

ناقشنا في هذا الفصل مسألة القوة المركزية وبيّنّا كيف أن فصل المتغيرات في معادلة شرودينغر يؤدي الى المسألة وحيدة البعد المكافئة (الشعاعية) بينما تسبب التبعية الزاوية ازدياد الحد المركزي في الكمون الفعال الخاص بالحركة الشعاعية كما جرت دراسة ذرة الهيدروجين مع مناقشة نوعية وتحليلية للدالات الموجية الشعاعية التي

وردت أثناء ذلك اضافة الى رسم عدد منها . وتم أيضاً تقديم معالجة لحركة البروتون في ذرة الهيدروجين مما أفضى الى تعديل طفيف على المستويات الطاقية في نموذج « النواة ذات الكتلة اللانهائية ».

وكان المتذبذب التوافقي ثلاثي الأبعاد هو المثال التالي الذي تعرض للدراسة حيث كشفت التقنيات القائمة على أساس مؤثر المرقاة مرة أخرى عن قدرتها على توليد جملة تامة من الدالات الموجية . كما أن الجسيم الحر والذي عولج سابقاً كجسيم متحرر من القوى قد جرت دراسته بوصفه جسيماً يخضع لمجال قوة يساوي الصفر . حيث استخدمنا مجدداً مؤثرات المرقاة وأخيراً ناقشنا مفهوم التماثل واستخدمناه للبرهان على أن مجموعة جسيمات في حالة طاقية محددة وفي ظل شروط عامة تماماً تتميز بعزم ثنائي أقطاب كهربائي يساوي الصفر .

مسائل

10–1 بفرض أن دالة الطاقة الكامنة لجزيء ثنائي الذرات تملك الشكل $V(r) = \frac{C}{r^3} - \frac{D}{r^2}$ ، احسب العدد الصحيح ℓ_0 الذي يكون أكبر من العدد الكمي ℓ ، ولأجل جميع الحالات المقيدة .

10–2 تأكد من أن مؤثر التماثل هرميتي .

10–3 تأكد من أنه اذا كان الجسيم يتحرك ضمن كمون مركزي يملك حالة مقيدة واحدة على الأقل ، فإن الحالة الطاقية الدنيا هي حالة S .

10–4 أوجد المستويات الطاقية لجسيم حر محصور في صندوق كروي ذي جدران مثالية العكس وذلك بلغة جذور الدالات المعنية .

10–5 ناقش حركة جسيم كتلته m في كمون متناظر كروياً ، $V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{r^2}$ حيث β ثابت موجب . (توجيه : ادرس سلوك الدالة الموجية قرب مركز الاحداثيات متذكراً ضرورة أن تكون هذه الدالة مستنظمة) .

6–10 أوجد عامل الاستنظام الملائم للمعادلة (10–51)

7–10 بيّن أن :

$$[P_+, (x + iy)] \equiv (P_x + iP_y)(x + iy) - (x + iy)(P_x + iP_y) = 0$$

الفصل الحادي عشر

التمثيل المصفوفي

11 −1 التمثيل المصفوفي للدالة الموجية والمؤثرات :

لقد بينا في الفصل السابق أن التوصيف الكامل لحالة النظام الحركي يتأمن بوساطة الدالة الموجية $\psi(r_1, r_2, \ldots)$ للحالة المعنية . أما هذا الفصل فمكرس لطرائق متعددة في تمثيل الدالة الموجية وبالتالي تمثيل الحالة مما يقودنا الى صيغ بديلة من شكلانية ميكانيك الكمْ *

ولأجل البدء ، سنختار جملة تامة متعامدة مستنظمة من الدالات $U_j(r_1, r_2, \ldots)$ والتي تحقق المعادلات التالية :

$$(u_j, u_k) \equiv \int \overline{u_j} u_k \, dr_1 \, dr_2 \cdots = \delta_{jk} \tag{11-1}$$

وبقصد التبسيط سنفترض أن u_j متقطعة ونهائية وعادة يتطلب نشر دالة

(*) تاريخياً ، تم تقديم الصياغة المصفوفية لميكانيك الكمّ ، في وقت سبق بقليل ظهور شكلانية الميكانيك الموجي التي كنا نعتمدها حتى الآن . انظر :

W. Heisenberg ,

"Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen," *Z. Physik* **33,** 879 (1925); M. Born and P. Jordan, "Zur Quantenmechanik," *Z. Physik* **34,** 858 (1925); M. Born, W. Heisenberg, and P. Jordan, "Zur Quantenmechanik II," *Z. Physik* **35,** 557 (1925).

وقد جرى البرهان على تكافؤ الشكلانية الموجية والشكلانية المصفوفية من قبل شرودينغر عام 1926 . انظر :

E. Schrödinger

"Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen," *Ann. Physik* **79,** 734 (1926).

موجية اختيارية أن توجد جملة لانهائية من الدالات المتعامدة المستنظمة . ولكن تستطيع جملة نهائية أن تكون كافية لنشر دالات من صف محدود .

وسيتم تعميق العرض الحالي لاحقاً ليشمل حالات الجمل اللانهائية المقترنة (أو غير المقترنة) بنطاق متصل من القيم المميزة .

بما أن ψ تشكل جملة تامة ، فإن أية دالة موجية U_j جائزة فيزيائياً ويمكن نشرها بلغة هذه الجملة :

$$\psi = \sum_j a_j u_j \tag{11-2}$$

حيث :

$$a_j = (u_j, \psi) \tag{11-3}$$

تمثل جملة الأعداد a_j توصيفاً كاملاً للحالة فيها اذا افترضنا الدالات U_j معطاة ومعروفة ولذا يقال عن هذه الجملة من الأعداد a_j إنها تشكل تمثيلاً للدالة الموجية ψ .

وهناك طراز من المعادلات كثيراً ما نصادفه في شكلانية ميكانيك الكم ، وهو :

$$Q\psi = \psi' \tag{11-4}$$

حيث : Q مؤثر تفاضلي وبعد نشر ψ و ψ' كلتيهما بلغة u_j تصبح المعادلة (2–11) كالآتي :

$$Q \sum_j a_j u_j = \sum_j a'_j u_j \tag{11-5}$$

ويؤدي كل من ضرب الطرفين هنا $\overline{u_k}$ والمكاملة على كل الفراغ الى ما يلي :

$$\sum_j Q_{kj} a_j = a'_k \tag{11-6}$$

حيث :

$$Q_{kj} = (u_k, Qu_j) \equiv \int \overline{u_k} Q u_j \, dr_1 \, dr_2 \cdots \tag{11-7}$$

ويعرف Q_{kj} بأنه عنصر المصفوفة Q.

من المناسب التعبير عن المعادلة (6–11) بوساطة ترميز المصفوفات اذ يمكن

ترتيب العناصر Q_{kj} في نسق مربع كهذا :

$$\mathsf{Q} \equiv \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} & \cdots \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} & \cdots \\ \vdots & & & \end{bmatrix} \qquad (11-8)$$

ويُعرَّف هذا النسق على أنه المصفوفة Q . ويمكننا ، وبطريقة مماثلة ، ترتيب كلٍّ من جملتي الأعداد a_j و a'_j في نسق خطي ، يُعرف بأنه **متجه ـ عمود (أو مصفوفة ـ عمود)**:

$$\mathsf{a} \equiv \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{bmatrix} ; \qquad \mathsf{a}' \equiv \begin{bmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \qquad (11-9)$$

وعبر الترميز المصفوفي تؤول المعادلة (11−6) الى :

$$\mathsf{Qa} = \mathsf{a}' \qquad (11-10)$$

حيث تعبر المعادلة (11−6) عن قانون ضرب المصفوفات .

2−11 جبر المصفوفات .

بالاضافة الى حالة ضرب المصفوفة المربعة بمتجه ـ عمود يمكن اجراء عمليات جبرية على المصفوفات لها طابع أكثر عمومية وتعالج الفقرة الراهنة هذه الخواص الجبرية للمصفوفات . ولقد رأينا أعلاه أن المصفوفات لا تكون بالضرورة نسقاً مربعاً كما هو حال المتجه ـ العمود a. واذا كانت مصفوفتان تملكان أبعاداً متساوية أي اذا كان عدد الأسطر فيهما متساوياً وعدد الأعمدة متساوياً . فمن الممكن تعريف جمع المصفوفتين :

$$\mathsf{R} + \mathsf{S} = \mathsf{T} \qquad (11-11)$$

وتكون قاعدة الجمع هي :

$$R_{ij} + S_{ij} = T_{ij} \qquad (11-12)$$

والقانون العام لضرب مصفوفتين هو :

$$RS = T \qquad (11-13)$$

ويُعطى بالصيغة :

$$\sum_k R_{ik}S_{kj} = T_{ij} \qquad (11-14)$$

من هنا يمكن رؤية أن المطالبة بتساوي عدد الأسطر في المصفوفة S مع عدد الأعمدة في المصفوفة R هي أمر ضروري لضرب المصفوفتين فالمصفوفة الناتجة عن الجداء سيكون لها عدد الأسطر الذي للمصفوفة R وعدد الأعمدة الذي للمصفوفة S .

يقتضي ما ورد أعلاه من قواعد جمع المصفوفات وضربها عدة من علاقات جبرية عامة وهي غالباً ما تؤخذ بمثابة فرضيات يقوم عليها جبر المصفوفات :

(1) الضرب عملية تجميعية

$$A(BC) = (AB)C \qquad (11-15)$$

(2) توجد مصفوفة التطابق المربعة I بحيث أن :

$$IA = A \qquad (11-16)$$

ومن الواضح طبعاً أن :

$$I_{jk} = \delta_{jk} \qquad (11-17)$$

(3) يكون القانون التوزيعي ساري المفعول :

$$A(B + C) = AB + AC \qquad (11-18)$$

(4) يمكن للمصفوفة المربعة أن تملك مصفوفة مقلوبة :

$$AA^{-1} = I = A^{-1}A \qquad (11-19)$$

واذا كانت تملكها يقال إن A مصفوفة غير شاذة .

(5) الضرب في الحالة العامة غير تبادلي :

$$AB \neq BA \qquad (11-20)$$

ولكن اذا كان $AB = BA$ يقال عن المصفوفتين إنها متبادلتان .

ومن المفيد هنا إيراد بعض التعريفات :

تكتب المصفوفة المنقولة بالنسبة للمصفوفة A على الشكل $\tilde{A}$ وتملك العناصر التالية :

$$\tilde{A}_{ij} \equiv A_{ji} \qquad (11-21)$$

يكتب القرين الهرميتي للمصفوفة A على الشكل A^* وهذه مصفوفة عناصرها هي :

$$A^*_{ij} \equiv \overline{A_{ji}} \qquad (11-22)$$

يساوي القرين الهرميتي لجداء مصفوفتين جداء قرينيهما الهرميتيين مأخوذاً بترتيب مقلوب :

$$(AB)^* = B^*A^* \qquad (11-23)$$

اذا كانت المصفوفة تساوي مصفوفتها المنقولة فهي متناظرة :

$$A_{ij} = \tilde{A}_{ij} = A_{ji} \qquad (11-24)$$

تكون المصفوفة هرميتية اذا كانت مساوية قرينها الهرميتي :

$$A_{ij} = A^*_{ij} = \overline{A_{ji}} \qquad (11-25)$$

تكون المصفوفة واحدية ، إذا كانت مصفوفتها العكسية مساوية قرينها الهرميتي :

$$A^{-1}_{ij} = A^*_{ij} \qquad (11-26)$$

يكون تمثيل مؤثر هرميتي بوساطة مصفوفات هرميتياً لأن :

$$\begin{aligned} \overline{Q_{jk}} &\equiv \overline{(u_j, Qu_k)} \\ &= (Qu_k, u_j) \\ &= (u_k, Qu_j) \\ &\equiv Q_{kj} \end{aligned} \qquad (11-27)$$

حيث تتوقف الخطوة الثالثة على الطابع الهرميتي للمؤثر Q .

تساوي مصفوفة جداء مؤثرين جداء المصفوفتين الموافقتين لهما ، وهذا ما يمكن تبيانه بالاستفادة من علاقة الاغلاق المستخرجة في الفصل السادس أي المعـــادلة (6−57) :

$$\sum_j \overline{u_j}(r_1, r_2, \ldots)u_j(r'_1, r'_2, \ldots) = \delta(r_1 - r'_1)\,\delta(r_2 - r'_2)\cdots \qquad (11-28)$$

ولأجل تبسيط الترميز ، سنفترض فيما يلي أن النظام الفيزيائي قابل للتوصيف بوساطة الاحداثيات r فجداء مصفوفتين يعطى وكما ورد أعلاه بالعلاقة التالية :

$$\sum_k Q_{jk}P_{kl} = \sum_k (u_j, \mathrm{Q}u_k)(u_k, \mathrm{P}u_l) \qquad (11-29)$$

$$\equiv \sum_k \int \overline{u_j}\mathrm{Q}u_k\, dr \int \overline{u_k}\mathrm{P}u_l\, dr'$$

وبناء على علاقة الاغلاق أي المعادلة (11−28) فإن هذا يساوي :

$$\begin{aligned}\sum_k Q_{jk}P_{kl} &= \int \overline{u_j}\mathrm{Q}\,\delta(r - r')\mathrm{P}u_l\, dr\, dr' \\ &= \int \overline{\mathrm{Q}u_j}\,\delta(r - r')\mathrm{P}u_l\, dr\, dr' \qquad (11-30)\\ &= \int \overline{\mathrm{Q}u_j}\mathrm{P}u_l\, dr \\ &= \int \overline{u_j}\mathrm{Q}\mathrm{P}u_l\, dr \\ &\equiv [\mathrm{QP}]_{jl}\end{aligned}$$

من هنا ينتج أن مصفوفات المؤثرات متبادلة هي أيضاً وأن مصفوفة المؤثر المقلوب للمؤثر Q هي مصفوفة مقلوبة بالنسبة للمصفوفة Q ، فالخواص الجبرية للمؤثرات التفاضلية تتجلى في مصفوفاتها .

من المرغوب فيه عادة أخذ جملة الدالات u_k المستخدمة كقاعدة للتمثيل المصفوفي ، بحيث تكون دالات مميزة لمؤثر ما من مؤثرات ميكانيك الكم . فمثلاً يمكن أن تكون u_k دالات مميزة لمؤثر هاملتون :

$$\mathrm{H}_{\mathrm{Uk}} = E_k u_k \qquad (11-31)$$

وعندئذٍ

$$H_{ij} \equiv (u_i, \mathrm{H}u_j) = (u_i, E_j u_j) = E_j\, \delta_{ij} \qquad (11-32)$$

يملك المؤثر H في هذه الحالة عناصر مختلفة عن الصفر فقط على طول قطر المصفوفة ، ويقال عن مصفوفة كهذه إنها قطرية واذا كانت الجملة المتعامدة المستنظمة من الدالات القاعدية هي في الوقت ذاته جملة دالات مميزة لعدة من مؤثرات متبادلة فإن مصفوفات جميع هذه المؤثرات هي مصفوفات قطرية .

11-3 أشكال التمثيل المصفوفي .

اذا كانت الدالات القاعدية في الجملة المتعامدة المستنظمة تابعة للزمن فان معادلة شرودينغر لا تغير شكلها بسبب التحويل الى التمثيل المصفوفي ولتكن معاملات النشر متمثلة بـ $\psi_n(t)$ أي أن :

$$\psi(r, t) \equiv \sum_n \psi_n(t) u_n(r) \qquad (11-33)$$

ويفضي تعويض هذه العلاقة في معادلة شرودينغر الى :

$$\mathrm{H}\psi = i\hbar \frac{d}{dt} \psi \qquad (11-34)$$

يحتاج الطرف الأيمن في هذه المعادلة بعض الايضاح : تشكل المشتقة الزمنية للمصفوفة ψ ذات العناصر ψ_j مصفوفة عناصرها هي $\dot{\psi}_j$

يُعرف هذا التمثيل والذي تكون الدالات القاعدية فيه تابعة زمنياً (مما يجعل المتجه الموجي ψ تابعاً للزمن) تحت اسم تمثيل شرودينغر .

ويكون الشكل الآخر من التمثيل المصفوفي والمعروف باسم تمثيل هايزنبرغ ، مفيداً هو أيضاً في بعض الأحيان . لنأخذ جملة من الدالات u_n التابعة لـ r و t كليهما أي جملة متعامدة مستنظمة في لحظة t = 0 وتلبي معادلة شرودينغر . تستمر هذه الجملة في كونها متعامدة مستنظمة في كل الأوقات كما سنرى أدناه :

$$\mathrm{H}u_n = i\hbar \frac{\partial u_n}{\partial t} \qquad (11-35)$$

وعندئذ يكون :

$$(u_m, \mathrm{H}u_n) = i\hbar \left(u_m, \frac{\partial}{\partial t} u_n \right) \qquad (11-36)$$

وبطريقة أخرى :

$$(u_n, \mathrm{H}u_m) = i\hbar\left(u_n, \frac{\partial}{\partial t}\, u_m\right) \qquad (11-37)$$

أو :

$$(\mathrm{H}u_m, u_n) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\, u_m, u_n\right) \qquad (11-38)$$

وبما أن H مؤثر هرميتي يمكن كتابة المعادلة $(11-36)$ على النحو التالي :

$$(\mathrm{H}u_m, u_n) = +i\hbar\left(u_m, \frac{\partial}{\partial t}\, u_n\right) \qquad (11-39)$$

ويسفر طرح المعادلة $(11-38)$ من المعادلة $(11-39)$ عن ما يلي :

$$\begin{aligned} 0 &= i\hbar\left[\left(u_m, \frac{\partial}{\partial t}\, u_n\right) + \left(\frac{\partial}{\partial t}\, u_m, u_n\right)\right] \\ &= i\hbar\, \frac{d}{dt}\, (u_m, u_n) \end{aligned} \qquad (11-40)$$

مما يقتضي أن لا يتغير تعامد جملة الدالات u_n واستنظامها مع مرور الزمن .
وبما أن :

$$(u_m, u_n) = \delta_{mn} \qquad (11-41)$$

فإنه يمكن طوال الوقت استخدام الدالات u_n للحصول على التمثيل المصفوفي .
ليكن :

$$\psi \equiv \sum_n \psi_n u_n(r, t) \qquad (11-42)$$

حيث كل حد في هذا المجموع يلبي معادلة شرودينغر ولذلك فإن المجموع نفسه وبمعاملاته الثابتة ψ_n هو أيضاً يلبي هذه المعادلة وتمثيل الدالة الموجية ψ (التي هي حل لمعادلة شرودينغر) تابع زمنياً أي أن المعاملات ψ_n والتي تكوِّن التمثيل المعني تابعة للزمن .

من ناحية ثانية يكون المؤثر أيضاً في هذا التمثيل عادةً تابعاً للزمن . ولنأخذ مؤثراً عناصر مصفوفية كالتالي :

$$\dot{Q}_{ij} = (u_i, Qu_j) \qquad (11-43)$$

وتملك المشتقة الزمنية لهذه المصفوفة العناصر التالية :

$$\dot{Q}_{ij} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial t}, Qu_j\right) + \left(u_i, Q\frac{\partial u_j}{\partial t}\right) + \left(u_i, \frac{\partial Q}{\partial t} u_j\right) \qquad (11-44)$$

وهذا مايمكن كتابته اعتماداً على المعادلة (11−35) ، كما يلي :

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ij} &= \frac{i}{\hbar}[(Hu_i, Qu_j) + (u_i, QHu_j)] + \left(u_i, \frac{\partial Q}{\partial t} u_j\right) \\ &= \frac{i}{\hbar}(u_i, [HQ - QH]u_j) + \left(u_i, \frac{\partial Q}{\partial t} u_j\right)\end{aligned} \qquad (11-45)$$

طالما أن H مؤثر هرميتي وهكذا توجد ثمة علاقة تربط بين المصفوفات هي :

$$\dot{Q} = \frac{i}{\hbar}[H, Q] + \frac{\partial Q}{\partial t} \qquad (11-46)$$

وانطلاقاً من الرابط القائم بين المبادل في ميكانيك الكم وقوس بواسون الكلاسيكي (وهو الرابط الذي أُدخل بحكم الفرضية 7 وما تلاه من نقاش في الفصل السادس) نجد أن المكافىء الكلاسيكي للمعادلة السابقة هو :

$$\dot{Q} = \{Q, H\} + \frac{\partial Q}{\partial t} \qquad (11-47)$$

وبكلمات أخرى فإن أية مصفوفة Q تتميز بتبعية زمنية تجعلها تلبي المعادلة الكلاسيكية للحركة والتي تم استخلاصها في الفصل الخامس أي المعادلة (5−55) .

يمتاز شكل التمثيل الذي نوقش أعلاه والمعروف بتمثيل هايزنبرغ ، بكون التبعية للزمن مرتبطة بالمؤثرات فقط وهذه التبعية يمكن الحصول عليها من معادلات الحركة الكلاسيكية وهذا مثال اضافي آخر على الروابط الشكلانية الوثيقة جداً بين الصياغة الكماتية والصياغة الكلاسيكية .

إن الشكل التالي من التمثيل ، وهو **تمثيل المفاعلة** ، أيضاً كثير الاستعمال . ولنفترض أنه يمكن تجزئة مؤثر هاملتون الى جزءين هما H_0 وH_1 ، حيث أن الوضع الفيزيائي قيد البحث سوف يوضح كل مرة أي نوع من التجزئة يلائم المسألة المعنية . ولنختَرْ جملة متعامدة مستنظمة من الدالات القاعدية التي تلبي معادلة

شرودينغر لأجل المؤثر Ho بصفته مؤثر هاملتون :

$$H_0 u_k = i\hbar \frac{\partial u_k}{\partial t} \qquad (11-48)$$

واذا نشرنا الدالة الموجية ψ بلغة الدالات u_k :

$$\psi = \sum_k \psi_k u_k \qquad (11-49)$$

فإن معادلة شرودينغر الكاملة لأجل $H = H_0 + H_1$ تصبح على الشكل التالي :

$$H \sum_k \psi_k u_k = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k \psi_k u_k \qquad (11-50)$$

وبما أن u_k تحقق المعادلة (11-48) فإن ذلك يؤدي الى :

$$H_1 \sum_k \psi_k u_k + i\hbar \sum_k \psi_k \frac{\partial}{\partial t} u_k = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k \psi_k u_k \qquad (11-51)$$

أو :

$$H_1 \sum_k \psi_k u_k = i\hbar \sum_k \frac{\partial \psi_k}{\partial t} u_k \qquad (11-52)$$

اذا ما ضربنا كلاً من طرفي هذه المعادلة ب $\overline{u_m}$ من ناحية اليسار وأجرينا مكاملة على كل الفراغ فإنها تصبح معادلة مصفوفية

$$H_1 \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \qquad (11-53)$$

ان معادلات الحركة بالنسبة لأية مصفوفة Q تابعة زمنياً هي

$$\dot{Q} = \frac{i}{\hbar} [H_0, Q] \qquad (11-54)$$

بلغة تمثيل المفاعلة هدا (والذي يسمى كذلك لأن H_1 يؤخذ عموماً بمثابة حدٌّ في مؤثر هاملتون يعبر عن المفاعلة بين نظامين متمايزين).

يجب أن نلاحظ أن المعادلتين (11-53) و (11-54) تصلان بنا الى تمثيل هايزنبرغ ، أي الى ψ و $\dot{Q}$ التابعين زمنياً والمحددين بالمعادلة (11-46) ، عندما

$H_1 = 0$. ويكون تمثيل المفاعلة مفيداً وعلى سبيل التخصيص حين يكون H_1 صغيراً ، أي حين H_1 يؤثر في القيم المميزة لـ H مجرد تأثير طفيف ويمكن في ظل هذه الشروط استخدام الطرائق التقريبية المعروفة باسم تقنيات الاضطراب وهذا ما سيناقش في الفصل الرابع عشر .

ويجب أن نلاحظ أنه لايوجد تمثيل فريد يمكن وصفه بأنه تمثيل شرودينغر أو تمثيل هايزنبرغ أو تمثيل المفاعلة لأن توصيف جملة الدالات القاعدية المتعامدة المستنظمة لا يجري على نحو خصوصي ما . ولكن ومن حين لآخر يكون من الملائم فرض تقييد على تمثيل هايزنبرغ بوساطة المطالبة بأن تكون الطاقة (مؤثر هاملتون) قطرية وكما قد يكون مفيداً فرض تقييد آخر بالمطالبة بأن تكون الجملة التامة من المؤثرات المتبادلة مع مؤثر هاملتون قطرية في آن واحد ، وذلك أسوة بمؤثر هاملتون ذاته . ويحدد اختيار جملة تامة من المؤثرات التمثيل على نحو فريد باستثناء ترتيب الأسطر والأعمدة في المصفوفات وكذلك باستثناء معامل طَوْرِيّ هو $\exp(i\delta_k)$ يمكن أن تضرب به كل من الدالات القاعدية u_k . وربما كان السبيل الأسهل لرؤية ذلك هو دراسة الدالات المميزة لـ H ، وذلك عندما تكون جميع القيم المميزة غير مفككة . فكما رأينا وأثناء مناقشة المبرهنة 8 في الفصل السادس فإن الدالات المميزة لجملة مؤثرات متبادلة تشكل جملة فريدة تامة قابلة للضرب بعامل جداء اختياري يجب أن يكون وانطلاقاً من متطلبات الاستنظام على شكل الدالة $\exp(i\delta_k)$.

11-4 المصفوفات اللانهائية .

اقتصرت المناقشة حتى الآن على حالة الفراغات نهائية الأبعاد ، والتي تمتاز بجملة نهائية متقطعة من الدالات القاعدية u_j . ولكن في الحالة العامة ، سوف تتطلب موضوعات فيزيائية هامة أن يجري استخدام جملة لانهائية من الدالات القاعدية لتمثيلها بشكل لائق . وسوف نفترض أن نتائج النظرية الخاصة بحالة الأبعاد النهائية التي نوقشت أعلاه يمكن تطبيقها مباشرة على حالة الأبعاد اللانهائية ، اذ إن المعالجة الدقيقة لهذه المشكلة تخرج من نطاق هذا الكتاب .

وحتى في حال مد المعالجة بهذا الشكل ، لتشمل الفراغات لانهائية الأبعاد ، فإن الافتراض بأن الدالات القاعدية تكون جملة متقطعة يقتضي أن يكون النظام الكماتي محصوراً في صندوق (كبير جداً ، لربما)، ذلك لأنه يمكن تبيان أن الدالات

المميزة وفي حالة النظام غير المقيد سوف تشغل وعلى العموم نطاقاً متصلاً من الدالات . ولأجل تبسيط المعالجة بالنسبة لهذا الموقف المعقد نسبياً سيقتصر النقاش على جملة متصلة ذات معلم منفرد : لنأخذ جملة تامة من الدالات $u_q(r)$ ، حيث تتخذ q جميع القيم ما بين $-\infty$ و $+\infty$ ، ويفترض في هذه الدالات أن تكون متعامدة ومستنظمة ، أي أن :

$$(u_q, u_{q'}) = \delta(q - q') \qquad (11-55)$$

(راجع النقاش بصدد المعادلة (6-46) !). وتكون هذه المعادلة مشابهة جداً لعلاقة الاغلاق ،

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_q^*(r) u_q(r')\, dq = \delta(r - r') \qquad (11-56)$$

باستثناء أنه قد تم استبدال فراغي المكاملة أحدهما بالآخر .

وبما أن الجملة $U_q(r)$ تامة ، يمكن نشر أية دالة موجية ψ جائزة فيزيائياً على الشكل التالي :

$$\psi(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q) u_q(r)\, dq \qquad (11-57)$$

نلاحظ أن :

$$\int |\psi(r)|^2\, dr = \int |\psi(q)|^2\, dq \qquad (11-58)$$

وقد صادفنا سابقاً حالة خصوصية من حالات هذه العلاقة عبر المعادلة (48-4)، حيث كان متجه الانتشار k يلعب الدور الذي يلعبه المتغير المتصل العام q في هذا النقاش . ويمكن عدّ الدالة $\psi(q)$ المعرَّفة بوساطة المعادلة (11-57) على أنها تمثيل لـ ψ بوساطة مصفوفة لانهائية . وفي الواقع يمكن عدّ $\psi(r)$ ذاتها تمثيلاً بوساطة مصفوفة لا نهائية يعتمد متجهات قاعدية هي $\delta(r - r'')$:

$$\psi(r) = \int \psi(r')\, \delta(r - r')\, dr' \qquad (11-59)$$

وهذا ما يعرف أحياناً باسم **التمثيل** «r» (التمثيل الموضعي).

واذا استخدمنا القاعدة المتعامدة التي تكونها $u_q(r)$ ، يمكننا الحصول على

تمثيل $\psi(q)$ فاستخدام كل من المعادلة (11−57) وعلاقة التعامد والاستنظام (11−55) ،، يمكننا من التوصل الى :

$$
\begin{aligned}
(u_q, \psi) \equiv \int \overline{u_q}(r)\psi(r)\, dr &= \iint \psi(q')\overline{u_q}(r)u_{q'}(r)\, dr\, dq' \\
&= \int \psi(q')\, \delta(q' - q)\, dq' \\
&= \psi(q)
\end{aligned}
\tag{11−60}
$$

وبالمقارنة مع المعادلة (11−7) ، سيكون تمثيل المؤثر الهرميتي Q ، بوساطة مصفوفة لانهائية كالآتي :

$$
Q_{q'q} \equiv \int \overline{u_{q'}} Q u_q\, dr \tag{11−61}
$$

ويجب أن نلاحظ أنه اذا كانت u_q هي الدالات المميزة لـ Q ، فعندئذٍ يكون :

$$
Q_{q'q} = q\, \delta(q - q') \tag{11−62}
$$

وتكون المصفوفة قطرية .

وتعطى عناصر الجداء الناتج عن ضرب مصفوفتين هرميتيتين بالعلاقة التالية :

$$
(\mathbf{QP})_{q'q''} = \int Q_{q'q} P_{qq''}\, dq \tag{11−63}
$$

وهي شبيهة بالمعادلة (11−14) في حالة الجملة المتقطعة .

وعلى نحو مماثل ، تؤول المعادلة :

$$
\psi' = Q\psi \tag{11−64}
$$

وعبر تمثيلها المصفوفي الى :

$$
\boldsymbol{\psi}' = \mathbf{Q}\boldsymbol{\psi} \tag{11−65}
$$

أو إذا كتبناها على شكل مركبات :

$$
\psi'_q = \int Q_{qq'}\psi_{q'}\, dq' \equiv \int Q(q, q')\psi(q')\, dq' \tag{11−66}
$$

وإنه لمن المساعد أحياناً دراسة المؤثر Q بهذا التمثيل وذلك حيث يكون مؤثراً

تكاملياً $\int Q(q, q')\, dq'$ يؤثر في الدالة $\psi(q')$ لبعطي النتيجة :

$$\psi'_q = \int Q(q, q')\, dq' \psi(q') \qquad (11-67)$$

ومن الهام ملاحظة أن المؤثر التفاضلي Q يمكن أن يُكتَب على شكل مؤثر تكاملي وذلك عبر استخدام الدالات $\delta(r - r')$ بمثابة متجهات قاعدية وكما في المعادلة (11−59) فانطلاقاً من (11−61) ينتج أن :

$$Q(r, r') = \int \delta(r - r'')Q'' \delta(r' - r'')\, dr'' \qquad (11-68)$$

حيث يشير التأشير المزدوج لـ Q تحت علامة التكامل الى أنه يؤثر في المتغير «r″» . ولكن يمكن جعل Q يؤثر في المتغير r' ، وستتغير إشارة التكامل إذا كان Qمؤثراً وترياً :

$$\begin{aligned} Q(r, r') &= \pm\int \delta(r - r'')Q' \delta(r' - r'')\, dr'' \\ &= \pm Q' \delta(r - r') \\ &= Q\, \delta(r - r') \end{aligned} \qquad (11-69)$$

وهكذا فالمؤثر التكاملي المكافىء لـ Q هو $\int Q\, \delta(r - r')\, dr'$. وإذا أثر هذا المؤثر في $f(r)$ تكون النتيجة :

$$Qf(r) = \int Q\, \delta(r - r')\, dr' f(r') \qquad (11-70)$$

وبما أن الدالات المميزة لمؤثر الموضع r هي $\delta(r - r')$ (انظر المعادلة (38−4) وما بعدها)، يمكننا تطبيق المعادلة (11−62) للحصول على عناصر المصفوفة r ذات الدالات القاعدية $\delta(r - r')$:

$$r_{rr'} = r(r, r') = r\, \delta(r - r') \qquad (11-71)$$

ومن الواضح أن هذه المصفوفة قطرية وهذا التمثيل ـ كما كان متوقعاً ـ هو موضعي قطري .

11-5 خلاصة .

تم في هذا الفصل ادخال صياغة لميكانيك الكم مكافئة لسابقتها ، وتُعرف باسم الميكانيك المصفوفي . ولقد وجدنا أن الدالات الموجية والمؤثرات ـ وعلى حد سواء ـ يمكن كتابتها على شكل مصفوفات ، وأن هذه المصفوفات تخضع عندئذٍ لجملة من القواعد الخاصة بجبر المصفوفات وهي تتضمن الجداء التجميعي والجداء التوزيعي والجمع ووجود المصفوفة الواحدية وإمكان وجود المصفوفة المقلوبة وصفة عدم المبادلة في الحالة العامة . ومن ناحية أخرى فإن المؤثرات المتبادِلة ـ وكما رأينا ـ تمثيلات مصفوفية عبر مصفوفات متبادِلة .

وجرت مناقشة ثلاثة أشكال عامة من التمثيلات : تمثيل شرودينغر وتمثيل هيزنبرغ وتمثيل المفاعلة . إن الدالات القاعدية في تمثيل شرودينغر تابعة زمنياً ، مما يقود الى تمثيل للدالات الموجية تابع زمنياً . ومن ناحية أخرى ، يتميز تمثيل هايزنبرغ بتمثيلات للدالة الموجية مستقلة زمنياً ، وذلك نظراً لأنه يتم اختيار الدالات القاعدية بحيث تلبي معادلة شرودينغر التابعة زمنياً . ويتم في تمثيل المفاعلة تجزئة مؤثر هاملتون الى جزءين ، أحدهما يصف ـ عموماً ـ نظامَين مستقلَّين ، والآخر هو حد ترابط ضعيف . وعندئذٍ ، يجري اختيار الدالات القاعدية بمثابة حلول لمعادلة شرودينغر التي يُهمَل فيها حد الترابط .

نوقشت حالة الفراغات لا نهائية الأبعاد ، وعلى وجه الخصوص ، نوقشت التمثيلات المشتملة على توزيع متصل للدالات المميزة ، حيث وجدنا أن النتائج المتعلقة بحالة التقطع يمكن أخذها جميعاً ، من حيث الجوهر مع تغيير ثانوي . وجرى إدخال المؤثرات التكاملية بمثابة صياغة بديلة ملائمة أحياناً .

مسائل

11-1 (أ) لأية متغيرات تتبع الدالة الموجية في التمثيل الزخمي ؟ (ب) أي مدلول فيزيائي يمكن أن يربط بالقيمة المطلقة لهذه الدالة الموجية ؟ افترض أن النظام يتكون من جُسَيم وحيد (بدون برم).

11-2 لنأخذ المتذبذب التوافقي البسيط وحيد البعد . يتم في اللحظة $t = 0$ قياس

الموضع ويُحدَّد بأنه xo . بيِّن أن قياس الزخم بعد ربع دور $(t = \pi/2\omega)$ ملزم بأن يعطي النتيجة التالية :

$$p = -\sqrt{km}\, x_0$$

11–3 ماذا يمكن أن يقال عن القيم المميزة للمصفوفات الشاذة ؟

11–4 يتوجب في التمثيل الموضعي كتابة مصفوفة مؤثر هاملتون لأجل جسيم منفرد كالآتي :

$$H_{rr'} = \mathrm{H}\,\delta(r - r')$$

حيث H مؤثر هاملتون ويؤثر في r . بيِّن أن المصفوفة المقلوبة يجب أن تكتب بالشكل

$$H_{rr'}^{-1} = \sum_n E_n^{-1}\overline{\phi_n}(r')\phi_n(r)$$

حيث : En و ϕ_n ترمز الى كل من القيم المميزة والدالات المميزة بالترتيب . ويُفترض أن تكون جملة متعامدة ومستنظمة ، ويجب أن يُفسَّر المجموع أعلاه على أنه تكامل يشمل أي مقطع استمراري من توزيع الطاقة .

11–5 إن المصفوفة المتعامدة هي تلك التي تحقق العلاقة $\mathrm{T}^{-1} = \tilde{\mathrm{T}}$. (أ) بيِّن أن المصفوفة

$$\mathrm{T} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

التي تحقِّق دوران الاحداثيات بزاوية قدرها ϕ حول المحور Z ، هي مصفوفة متعامدة . (ب) ما هو المعيِّن det T ؟

11–6 في التمثيل الذي يكون L^2 و Lz فيه قطريين ، استحصل كل المتجهات التي تشكل متجهات مميزة مشتركة لـ L^2 و Lx وذلك حين تكون القيمة المميزة لـ L^2 تساوي $2\hbar^2$. (استخدم مصفوفة المسألة (11–5) .

11–7 مؤثر الاسقاط هو مؤثر يُسقِط المتجه على فراغ جزئي . فمثلاً ، المؤثر :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

يُسقِط المتجه

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

على الفراغ الجزئي ثنائي الأبعاد ليعطي

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ 0 \end{bmatrix}$$

(أ) بيِّن أن متجه إسقاط P يحقق المعادلة $P^2 - P = 0$ ويملك قيمتين مميزتين هما :0 و 1 .

(ب) بيِّن أن المؤثر التكاملي :

$$P_n(r) = \int u_n(r)\overline{u_n}(r')\, dr'$$

يُسقط أي متجه $\psi(r)$ على محور إحداثيات في الفراغ الهيلبرتي المعرَّف بالمتجه الواحدي المستنظم $u_n(r)$.

(ج) بيِّن أن مؤثر الاسقاط هرميتي .

(د) بيِّن أن :

$$P = \frac{1}{n}\sum_{q=1}^{n} \exp\left(2\pi \frac{i}{\hbar} \frac{q}{n} L_z\right)$$

هو مؤثر إسقاط لأجل الفراغ الجزئي الذي يتخذ العدد الكمي m_ℓ فيه كل القيم التي تشكل أضعافاً صحيحة لـ n .

8–11 إذا كانت A مصفوفة هرميتية ، تأكد من أن $\exp(iA)$ مصفوفة واحدية .

9–11 (أ) بيِّن أن المؤثر $Q \equiv P \sin \omega t - m\omega X \cos \omega t$ للمتذبذب التوافقي

البسيط ، هو في ـ تمثيل هايزنبرغ ـ مؤثر تابع زمنياً .

(ب) هل هو ثابت حركة ؟

(ج) هل يمكن جعله قطرياً في آن واحد مع مؤثر هاملتون ؟

الفصل الثاني عشر

زخم البرم الزاوي

التمثيل المصفوفي لمؤثرات الزخم الزاوي .

سوف نطبق الآن بعض نتائج الفصل السابق على موضوع هام جداً يتصل بالزخم الزاوي ، وفي البداية سنعرض شكلانية المصفوفات لأجل مؤثرات الزخم الزاوي المداري . فقد رأينا أن جملة الدالات التوافقية الكروية هي جملة متعامدة مستنظمة ، أي أن :

$$(Y_{lm},\, Y_{l'm'}) = \int Y_{lm} Y_{l'm'}\, d\phi \sin\theta\, d\theta = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'} \qquad (12-1)$$

وبالتالي يمكن للمرء نشر أية دالة موجية بلغة هذه الجملة من التوافقيات الكروية :

$$\psi = \sum_{l,m} a_{lm}(r,\, t)\, Y_{lm}(\theta,\, \phi) \qquad (12-2)$$

وتعطى معامِلات النشر بالعلاقة التالية :

$$(Y_{lm},\, \psi) = a_{lm} \qquad (12-3)$$

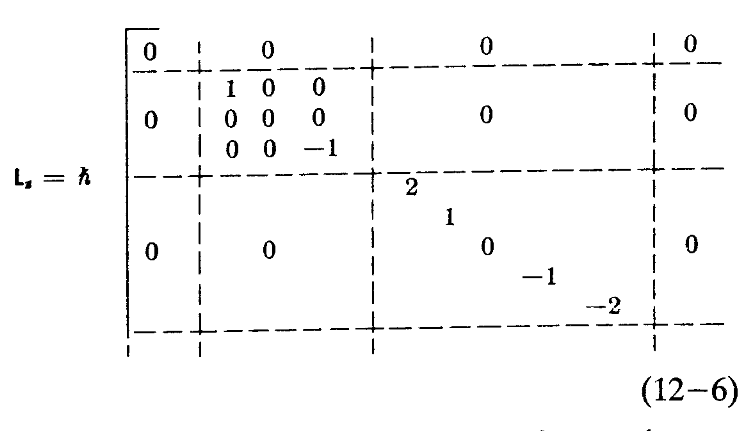
حيث يُجرى التكامل وفقاً للمتغيرات الزاوية فقط . وتبدو عناصر مصفوفة المؤثر الخاص بالمركَّبة z من الزخم الزاوي في هذا التمثيل كالآتي :

$$[\mathrm{L}_z]_{lm,l'm'} = (Y_{lm},\, \mathrm{L}_z Y_{l'm'}) = m'\hbar\, \delta_{ll'}\, \delta_{mm'} \qquad (12-4)$$

وبطريقة مماثلة ستكون عناصر المصفوفة الخاصة بمربع الزخم الزاوي هي :

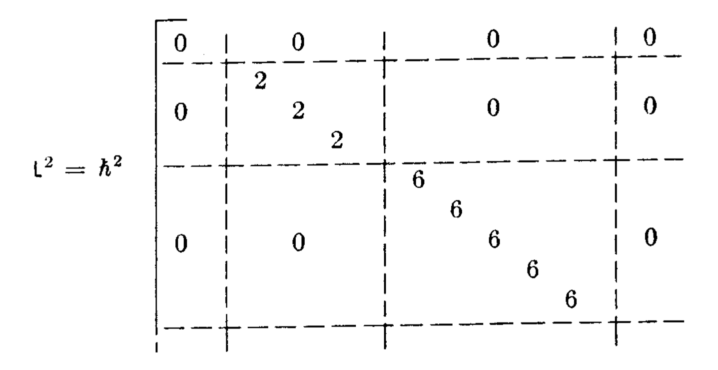
$$[\mathbf{L}^2]_{lm,l'm'} = (Y_{lm},\, \mathrm{L}^2 Y_{l'm'}) = l(l+1)\hbar^2\, \delta_{ll'}\, \delta_{mm'} \qquad (12-5)$$

سيتخذ تمثيل كل من L^2 و L_z المصفوفي ، وإذا ما كُتِب على هيئة مصفوفات مفصلة ، الشكل التالي :



(12–6)

ويجب أن نلاحظ أن العناصر في مثل هاتين المصفوفتين تساوي الصفر جميعها باستثناء تلك التي تقع على القطر ، وأن هذه العناصر القطرية هي القيم المميزة للمؤثرات المعنية . وتكون أسطر المصفوفات وأعمدتها مرتّبة بحيث أنه عندما يتحرك المرء من الزاوية التي في أعلى اليسار نحو الأسفل ، فإن الدليل ℓ يزداد واحداً كل $(2\ell + 1)$ سطراً ، بينما ينقص الدليل m واحداً بين سطر وآخر ، وذلك ابتداء من $m = l$ في السطر الأول من كل مصفوفة من المصفوفات الجزئية الداخلية .



(12–7)

وهكذا تم تقويم كلٍ من المصفوفتين Lz و L^2 في تمثيلهما القطري ، أما المهمة التالية فتكمن في حساب عناصر المصفوفتين الخاصتين بالمؤثرين L_y و L_x .

ولإنجاز ذلك تتم الاستفادة من المؤثرين L_+ و L_- وعلى الشكل الذي عُرِّفا به سابقاً . فبناءً على المعادلة (59−9) ، وبشكل مباشر ، يكون لدينا :

$$L_- Y_{lm} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, \hbar Y_{l,m-1} \qquad (12-8)$$

من هنا ، نستطيع تقويم عناصر المصفوفة L_- :

$$\begin{aligned} [L_-]_{lm,l'm'} &= (Y_{lm}, L_- Y_{l'm'}) \\ &= \sqrt{(l'+m')(l'-m'+1)}\, \hbar\, \delta_{ll'}\, \delta_{m,m'-1} \end{aligned} \qquad (12-9)$$

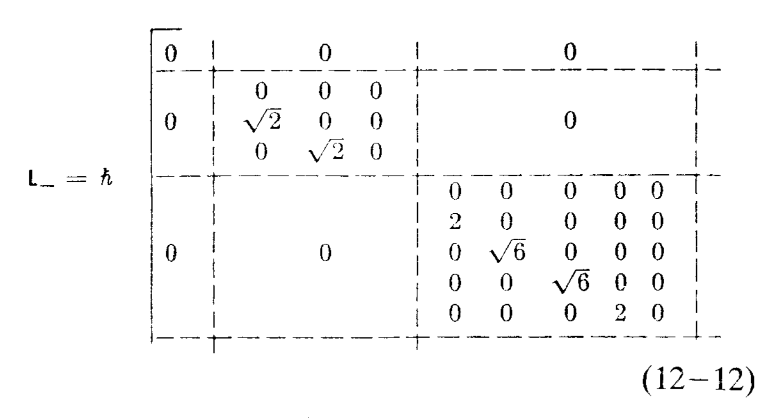
فبما أن المؤثرين L_+ و L_- قرينان هرميتيان :

$$\begin{aligned} [L_-]_{lm,l'm'} &= (L_+ Y_{lm}, Y_{l'm'}) \\ &= \overline{(Y_{l'm'}, L_+ Y_{lm})} \end{aligned} \qquad (12-10)$$

ترتبط عناصر المصفوفتين L_+ و L_- ، لذلك ، بالعلاقة :

$$[L_-]_{lm,l'm'} = \overline{[L_+]}_{l'm',lm} \qquad (12-11)$$

وتفضي كتابة هذه النتائج على شكل مصفوفة الى :



$$L_- = \hbar \left[\begin{array}{c|ccc|ccccc} 0 & & 0 & & & & 0 & & \\ \hline & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & & & 0 & & \\ & 0 & \sqrt{2} & 0 & & & & & \\ \hline & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & 0 & & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{array}\right]$$

(12−12)

ويتم الحصول على المصفوفة L_+ بالطبع ، بمجرد عكس العناصر في مصفوفة

عبر قطرها وأخذ مترافقاتها العقدية . وعندئذٍ نستطيع الحصول على **المصفوفة** Lx وانطلاقاً من L− و L+ ، وذلك بالاستفادة من العلاقة :

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \qquad (12-13)$$

ويمكن الحصول على المصفوفة L_y بطريقة مماثلة :

$$L_y = \frac{-i}{2}(L_+ - L_-) \qquad (12-14)$$

وهكذا فإن :

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{c|ccc|c} 0 & & 0 & & 0 \\ \hline & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ & 0 & 1 & 0 & \\ \hline 0 & & 0 & & \end{array} \right] \qquad (12-15)$$

و :

$$L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{c|ccc|c} 0 & & 0 & & 0 \\ \hline & 0 & -i & 0 & \\ 0 & i & 0 & -i & 0 \\ & 0 & i & 0 & \\ \hline 0 & & 0 & & \end{array} \right] \qquad (12-16)$$

بعد استعراض شكلانية المصفوفات لأجل مؤثرات الزخم الزاوي المداري ، سندرس الآن زخم البرم الزاوي للجسَيْم . فإذا كانت المتغيرات المستقلة والتي تقبل القياس في آن واحد ، تتضمن متغيراً داخلياً يصف اتجاه برم الجُسَيم ، فانه يمكن نشر الدالة الموجية بلغة الدالات المميزة لهذا المتغير :

$$\psi = \sum_{m_s=-s}^{+s} a_{m_s}(r, t)\phi_{m_s} \qquad (12-17)$$

إن دالات البرم ϕm_s ، التي تظهر في هذه المعادلة ، يجب عليها ـ وضمن منظور نظريةٍ أكثر كمالاً سنعرضها لاحقاً ـ أن تكون دالات لمتغيرات داخليةٍ ما خاصة

بالجسيم ، ربما لموضعه أو للجسيات الأصغر التي قد يتكون منها « الجُسَيم ». لكن ومن حسن الحظ أنه ليس من الضروري معرفة مثل هذه المتغيرات الداخلية إذا كانت المسائل المعنية لا تتناول البنية الداخلية للجسيم . وكما رأينا سابقاً ، من الممكن استخدام المعامِلات a_{m_s} ، وهي ـ أثناء نشر الدالات قيد البحث ـ دالات تابعة فقط لموضع الجسيم وللزمن ، وتتميز بدلائل تتعلق كلها بزخم البرم الزاوي .

وبغية عرض الشكلانية المرغوب فيها ، سندرس أولاً جسيماً زخمه الزاوي يساوي $\hbar$. فبَرْم الجسيم ، على العموم ، مثبَّت ، واتجاهه فقط هو الذي يستطيع التغير . وبالتالي فإن المؤثر S^2 له عدد كمي محدد يساوي ثابتاً وحسب . وفي حالة البرم المساوي الواحد والتي ندرسها الآن هنالك فقط ثلاثة اتجاهات ممكنة بالنسبة للبرم ، ونستطيع كتابة الدالة الموجية على هيئة مصفوفة ـ عمود :

$$\psi = \begin{bmatrix} a_1(r, t) \\ a_0(r, t) \\ a_{-1}(r, t) \end{bmatrix} = \psi(r, t, \phi_{m_s}) \qquad (12-18)$$

حيث : m_s يتخذ فقط القيم : $0 , \pm 1$ ، عناصر المصفوفة a_i دالات تابعة لكلٍ من موضع الجسيم والزمن . أما المصفوفات الخاصة بالمركَّبات الثلاث لزخم البرم الزاوي ، فيتم الحصول عليها من المعادلات (6−12) و (15 −12) و (16−12) وذلك بمجرد انتقاء المربعات الداخلية التي توافق في المصفوفة الحالات $(\ell=1)$

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix},$$

$$S_z = \hbar\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad 12-19)$$

ويمكننا، وعلى نحو مماثل كتابة المصفوفة S_2 وذلك بالانطلاق مباشرةً، من المعادلة(12-7):

$$S^2 = 2\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = 2\hbar^2 I \qquad (12-20)$$

واضح أن هذه هي ،ومن حيث الجوهر ، مصفوفة التطابق . وتكون القيم المميزة لـ Sz هي :

$$S_z\psi = m_s\psi \qquad (12-21)$$

أو ، برموز المصفوفات :

$$(\mathsf{S}_z - m_s\mathsf{I})\psi = 0 \qquad (12-22)$$

تؤول هذه العلاقة إلى جملة معادلات خطية، وذلك بالنسبة لمركبات ψ الثلاث المجهولة، وهي معادلات متجانسة لها حلول متميزة عن الصفر فقط حين يكون معيّن المعاملات مساوياً الصفر:

$$\det(\mathsf{S}_z - m_s\mathsf{I}) = 0 \qquad (12-23)$$

وإذا نشرنا المحدَّد ، نحصل على المعادلة

$$m_s(m_s^2 - \hbar^2) = 0 \qquad (12-22)$$

التي يحققها الجذور :

$$m_s = \hbar, 0, -\hbar \qquad (12-25)$$

وتبدو هذه النتيجة جديدة بالكاد ، ولكن استخلاصها تم سابقاً بقصد استعراض التقنيات الجبرية .

تتم في الشكلانية الراهنة قراءة $|a_1|^2$ على أنه احتمالية أن تتخذ المركبة Z من البرم S قيمة $+\hbar$ ، وذلك عندما يكون الجسيم متموضعاً في النقطة r . ويمكن كتابة القيمة المتوقعة لـ S_z على الشكل التالي :

$$\langle S_z\rangle_r = \frac{\hbar|a_1|^2 + 0\cdot|a_0|^2 + (-\hbar)|a_{-1}|^2}{\sum_{m_s}|a_{m_s}|^2} \qquad (12-26)$$

وبترميز المصفوفات يمكن التعبير عن العلاقة السابقة كالآتي :

$$\langle S_z\rangle_r = \frac{\psi^*\mathsf{S}_z\psi}{\psi^*\psi} \qquad (12-27)$$

وإذا كان المتجه ـ العمود مستنظماً على الواحدة ، فإن المخرج يساوي الواحد ؛ فالنجمة تشير هنا إلى المصفوفة القرنية هرميتياً ، والتي تنتج ـ وكما عرّفناها فيما سبق ـ

عن تبديل الأسطر بالأعمدة وأخذ المترافقات العقدية لكل عنصر فيها . فمثلاً :

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{bmatrix}^* = [\overline{a_1}, \overline{a_0}, \overline{a_{-1}}] \quad (12-28)$$

ويمكن التأكد بسهولة من أن القيمة المتوسطة الخاصة بكل من المركبتين الأخريين في المصفوفة S تقبل التمثيل على هذا النحو ، بحيث ان :

$$\langle S\rangle_r = \frac{\psi^* \mathbf{S}\psi}{\psi^*\psi} \quad (12-29)$$

أما إذا كنا ، وبدلاً من عدّ الجسيم متموضعاً في النقطة r ، سنحسب القيمة المتوسطة بالنسبة لكل مواضع الجسيم الممكنة ، فسنجد أن القيمة المتموضعة لمتجه زخم البرم الزاوي هي :

$$\langle S\rangle = (\psi, \mathbf{S}\psi) = \int \psi^* \mathbf{S}\psi \, dr \quad (12-30)$$

حيث يفترض أن ψ مستنظمة ، ويعني الترميز ، الذي بين قوسين ، إجراء مكاملة على جميع إحداثيات الموضع وإجراء الجمع لأجل كل متغيرات البرم المعطاة عبر جداء المصفوفات .

12–2 النظم ذات البرم 1/2 :

تتمتع النظم ذات البرم 1/2 بأهمية خاصة ، لأن هذا هو البرم الذي نصادفه لدى الجسيمات المستقرة : الالكترونات والبوزيترونات والبروتونات والنيترونات . (ويجب أن نعلم أن النيترون مستقر فقط ضمن النواة الذرية) . وتتخذ الدالة الموجية في هذه الحالة الشكل التالي :

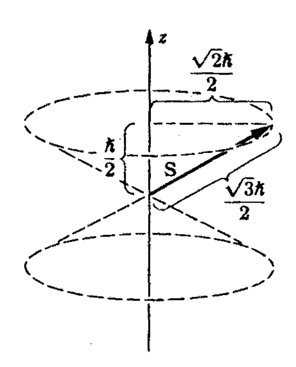
$$\psi = \begin{bmatrix} a_{1/2}(r, t) \\ a_{-1/2}(r, t) \end{bmatrix} \quad (12-31)$$

وبالاستفادة من إجراء مطابق لذلك الذي استخدم أعلاه ، يمكن الحصول على المؤثرات الخاصة بمركبات زخم البرم الزاوي ، وذلك من خلال تمثيل هذه المركبات عبر مصفوفات كما يلي :

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (12-32)$$

وتعرف المؤثرات$\sigma \equiv (2/\hbar)\mathbf{S}$باسم مؤثرات باولي للبرم .

ويجب أن نلاحظ أنه يوجد لدى الجسيمات ذات البرم 1/2 فقط اتجاهان ممكنان (حالتان ذاتياتان) للبرم ، وذلك بالقياس إلى اتجاه ما محدد في الفراغ ، وعادةً يكون هو اتجاه المحور Z . ولقد جرت العادة أن يربط الاتجاهان المذكوران بكون متجه البرم إما موازياً أو معاكساً للمحور Z . ومن ناحية أخرى ، يكون طول متجه البرم أكبر بكثير من مسقطه في الاتجاه Z ، ويمكن تبيان هذا الوضع بوساطة نموذج متجهي كما في الشكل (12—1) وهذه طريقة لجعل الاتجاهات الممكنة لمتجه البرم في الفراغ مرئية عيانياً . فمثلاً ، حين يكون S_z موجباً ، يتموضع متجه البرم في مكان ما على سطح مخروط على الرغم من أنه ليس ممكناً توصيف المركّبتين x و y بدقة . أما في الواقع ، فإن القيمتين لـ S_x و S_y ، وفي الحالة الموصفة بـ $S_z = 4\hbar/2$ ، تساويان الصفر ، ولكن القيمة المتوقعة لـ S_x^2 و S_y^2 في الحالة ذاتها لا تساوي الصفر بل تساوي $h^2/4$.



الشكل 12 — 1 : نموذج متجهي لزخم جُسَيْم برْمه 1/2 .

تمتاز المؤثرات الخاصة بمركبات البرم بالخواص الجبرية التالية :

$$S_xS_y + S_yS_x = 0 \qquad (12-33)$$

(وهو ما نعبر عنه بالقول إن هنالك ضد ـ تبادل بين S_xوS_y)،

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \qquad (12-34)$$

وأن :

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \qquad (12-35)$$

12–3 مبادرة برم الالكترون .

قبل إجراء معالجة الحالة المعنية في ميكانيك الكم يجدر بنا التمعن في سؤال ما هو السلوك الذي قد نتوقعه كلاسيكياً من الالكترون الذي يكون برمه ناجماً عن دوران كتلة الالكترون المشحونة حول محور يمر في مركزها إذا ما وضعت في مجال مغنطيسي منتظم يطبق خارجياً ؟ فتأثير مجال مغنطيسي كهذا هو الذي يسبب وجود عزم قوة يشد محور برم الالكترون نحو خط التوازي مع المجال المغنطيسي ويؤدي عزم القوة هذا إلى مبادرة محور البرم حول اتجاه المجال المغنطيسي . وبكلمات مغايرة ، يسلك الجسيم سلوك الدوّام ، وذلك بسبب زخم برمه الزاويّ . إن أي عزم قوة يشد نحو التوازي كلاً من محور البرم والمجال المغنطيسي من شأنه فقط أن يؤول إلى ظاهرة مبادرة البرم حول المجال ويبين الشكل (12–2) الحالة الكلاسيكية .

لندرس الآن معالجة الكترون ضمن المجال المغنطيسي في ميكانيك الكم . يملك الالكترون عزماً مغنطيسياً موازياً لمحور برمه ، وبالتالي يمكننا أن نربط به مؤثراً للعزم المغنطيسي هو :

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{mc}\,\mathbf{S} \qquad (12-36)$$

(وإذا تكلمنا بصرامة ، فإن العامل (e/mc) في هذه المعادلة هو تقريب ليس إلا) . فالقياس الحريص يبين أنه يجب أن يزيد على هذا بنحو % 0.1 ، ويقع النقاش التفصيلي للاحتمالات المتعلقة بمقدار هذا العزم خارج نطاق هذا النص ، حيث تجري معالجة المجال المغنطيسي بوصفه كمية كلاسيكية . أما إذا عولج هذا المجال ـ وإسوة بالالكترون ـ معالجة كماتية ، فيمكن البرهان على أن العامل (e/mc) يجب أن يتغير بمقدار ما يسمى « التصحيحات الاشعاعية » التي تسبب تغيراً يقارب % 0,1 في عامل التناسب هذا) .

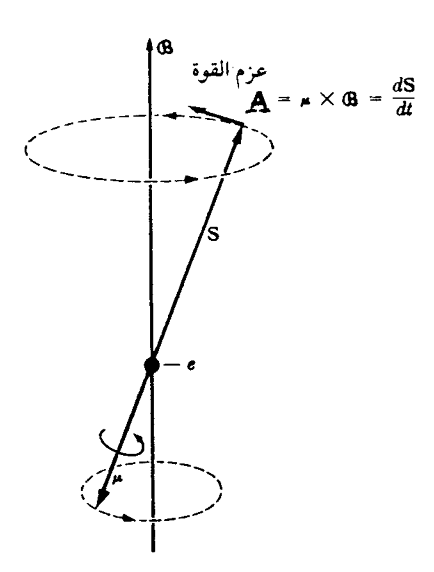
وإذا ما تجاهلنا كل المساهمات الأخرى في طاقة الالكترون (مثل الطاقة الحركية للانتقال) ، ونظرنا فقط إلى المفاعلة بين برم الالكترون والمجال المغنطيسي ، يكون التعبير الخاص بالطاقة ، والذي يمكن عدّه بمثابة مؤثر هاملتون للنظام ، هو :

$$\mathbf{H} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = +\frac{e}{mc}\,\mathbf{B}\cdot\mathbf{S} \qquad (12-37)$$

حيث المجال المغنطيسي معطى بالمتجه B . أما في الحالة الخاصة للمجال المغنطيسي

الساكن المنتظم $\mathcal{B}_0$ ذي الاتجاه Z ، فتؤول هذه المعادلة إلى ما يلي :

$$H = + \frac{e}{mc} \mathcal{B}_0 S_z \qquad (12-38)$$



الشكل 12-2. نموذج كلاسيكي لجُسَيْم ذي زخمْ زاوي وعزم ثنائي أقطاب مغنطيسي (موازي للزخم)، وذلك عندما يتوضع هذا الجسيم في مجال مغنطيسي. يشد عزم القوةA، والذي يؤثر في ثنائي الاقطاب المغنطيسي، باتجاه جعل الزخم الزاوي يبادر حول المجال المغنطيسي المطبّق خارجياً.

تكون قيم طاقة البرم في هذا المجال المغنطيسي معطاة عبر القيم المميزة لمعادلة شرودينغر المستقلة زمنياً :

$$H\psi = E\psi \qquad (12-39)$$

وبما أن القيمتين المميزتين لـ Sz هما $\pm \hbar/2$ ، فإن قيمتي الطاقة الممكنتين بالنسبة لبرم الالكترون ستكونان كما هو مبين في الشكل (12–3) . والحالتان الطاقيتان الموافقتان هما الحالتان اللتان يكون الالكترون فيهما إما موازياً أو معاكساً للمجال المغنطيسي .

وبغية البحث عن قرين في ميكانيك الكم لعملية المبادرة الكلاسيكية من قبل

S_z

$\frac{e\hbar \mathcal{B}_0}{2mc}$ $\frac{1}{2}\hbar$

الطاقة

$\frac{e\hbar \mathcal{B}_0}{2mc}$ $-\frac{1}{2}\hbar$

الشكل *12—3* قيمتا الطاقة الممكنتان بالنسبة لبرم الالكترون حين يوضع في مجال مغنطيسي منتظم .

برم الالكترون ، الذي لا يكـون في البداية موازياً لمجال (للمحور Z) سنفترض أن مركبة زخم البرم الزاوي الموازية للمحور x قد جرى قياسها في لحظة الزمن $t = 0$ وتم الحصول على قيمة $\frac{\hbar}{2}$. وهذا يعني أن الدالة الموجية في تلك اللحظة هي دالة مميزة للمؤثر S_x بقيمة مميزة هي $\frac{\hbar}{2}$:

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} \qquad (12-40)$$

إن معادلة شرودينغر التابعة زمنياً :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (12-41)$$

لابد أن تلبي من قبل الدالة الموجية للالكترون ، ومن السهل رؤية أن الدالة الموجية :

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}\exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)\\ \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)\end{bmatrix} \qquad (12-42)$$

تحقق معادلة شرودينغر (41—12) والشرط الابتدائي للمعادلة (14—12) ، علماً أن ω تساوي :

$$\omega = \frac{e\mathcal{B}_0}{mc} \qquad (12-43)$$

ومتجه الحالة في لحظة $t = 0$ هو :

$$S_x\psi(0) = \frac{\hbar}{2}\,\psi(0) \qquad (12-44)$$

وهكذا يكون البرم في لحظة $t = 0$ متموضعاً في الاتجاه الموجب لمحور x . ومن ناحية أخرى وفي لحظة زمن لاحقة $t = \pi/2\omega$ نجد أن :

$$S_y\psi\left(\frac{\pi}{2\omega}\right) = \frac{\hbar}{2}\,\psi\left(\frac{\pi}{2\omega}\right) \qquad (12-45)$$

وهذا ما يشير إلى أنه في لحظة الزمن اللاحقة هذه ، يتموضع البرم في الاتجاه الموجب لمحور y . وبشكل مماثل نجد أن :

$$S_x\psi\left(\frac{\pi}{\omega}\right) = -\,\frac{\hbar}{2}\,\psi\left(\frac{\pi}{\omega}\right),$$

$$S_y\psi\left(\frac{3\pi}{2\omega}\right) = -\,\frac{\hbar}{2}\,\psi\left(\frac{3\pi}{2\omega}\right) \qquad (12-46)$$

مما يدل على أن البرم يستطيع ، وفي زمن لاحق ، أن يتموضع في الاتجاه السالب للمحور x و- إذا أخذنا زمناً متأخراً أكثر- في الاتجاه السالب للمحور y . وتحدث مبادرة البرم حول المجال $\mathcal{B}_0$ بتردد قدره ω يعطى بالمعادلة (43-12) يكون تردد المبادرة هذا مطابقاً لذلك الذي تم حسابه كلاسيكياً وذلك بالانطلاق من هذه الشروط ذاتها . ويتبين اقتراب المبادرة التي تظهر في ميكانيك الكم هنا من النتيجة الكلاسيكية ، بسهولة أكبر ، وذلك من خلال حساب القيمة المتوقعة للبرم في الاتجاه x :

$$\langle S_x\rangle = \psi^*(t)S_x\psi(t) = \frac{1}{2}\left[\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right),\ \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)\right] S_x \begin{bmatrix}\exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)\\ \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)\end{bmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\cos\omega t \qquad (12-47)$$

حيث نجد أن القيمة المتوسطة للمركبة x من الزخم الزاوي تتذبذب بتردد زاوي قدره ω تماماً كما تفعل في حالة الحركة الكلاسيكية للدوّام . أما المركبة y فيمكن وعلى نحو مماثل ، تبيان أنها تتذبذب بالتردد نفسه :

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t \qquad (12-48)$$

ويمكن رؤية هذه النتيجة بطريقة أخرى أيضاً . ولنأخذ المؤثر المعرّف بالعلاقة التالية :

$$S^{\dagger} \equiv S_x \cos \omega t + S_y \sin \omega t \qquad (12-49)$$

والذي يمثل مركّبة البرم في المستوى xy على طول خط الدوران بتردد دائري حول المحور Z قدره ω . ويبين التعويض المباشر أن الدالة الموجية في المعادلة (42—12) هي دالة مميزة لهذا المؤثر :

$$S^{\dagger} \psi = \frac{\hbar}{2} \psi \qquad (12-50)$$

وتؤكد هذه المعادلة أن البرم يمتلك مركبة ثابتة تساوي $\frac{\hbar}{2}$ على طول خط الدوران المذكور ، وهذه نتيجة مطابقة لتلك التي حصلنا عليها اعلاه وذلك ضمن اعتبارات مختلفة نوعاً ما .

12—4 الطنين البارامغنطيسي.

إن المسألة التالية التي سندرسها ـ وهي مسألة أصعب إلى حد ما ، ولكنها أكثر تشويقاً ـ هي مسألة وضع الالكترون الذي يبرم في مجال مغنطيسي ساكن منتظم ، متمتعاً بمجال مغنطيسي تذبذبي معامد للمجال الساكن . وسوف نبحث ، إذاً ، عملية الانتقال بين الحالات الطاقية بسبب المجال التذبذبي ، أو ، بكلمات مغايرة ، احتمالية أن يؤدي امتصاص الفوتون وانبعاثه إلى قفزات من حالة طاقية إلى حالة طاقية أخرى .

ولكن علينا أولاً أن ندرس كيف سيعالج نظام من متجهات البرم ، وذلك بدلاً من معالجة برم فردي واحد . ولأجل ذلك ، سنقوم ، وفي البداية بحساب المغنطة الساكنة التي يتعرض لها نظام يحتوي على N الكتروناً في واحدة الحجم ، وجميعها ذات برم حر التوجه بالنسبة للمجال المغنطيسي . ومن المفتر ض أن الالكترونات تكون في حالة توازن حراري مع محيطها وتحت ظل حرارة مطلقة قدرها T . ولأجل التبسيط ، سنبدي افتراضاً إضافياً بأن الطاقة الحرارية المتوسطة لكل متجه برم ، وهي kT ، أكبر بالمقارنة مع طاقة المفاعلة بين البرم والمجال المغنطيسي . وبكلمات أخرى :

$$kT \gg \left| \frac{e\hbar \mathcal{B}_0}{mc} \right| \qquad (12-51)$$

وسوف نفترض أن احتمالية شغل الحالة الطاقية تتناسب طرداً مع عامل بولتزمان $\exp(-E/kT)$ ولسوف يتم تعليل هذا الافتراض في الفصل الثامن عشر . وبالتالي ، فإن مغنطة الوسط تعطى بالعلاقة التالية :

$$M = -\mu_z N \left[\frac{\exp(-e\hbar \mathcal{B}_0/mckT) - 1}{\exp(-e\hbar \mathcal{B}_0/mckT) + 1} \right] \approx \frac{1}{2} \mu_z \frac{e\hbar \mathcal{B}_0}{mckT} N =$$

$$= \frac{N}{2} \frac{e^2 \hbar \mathcal{B}_0}{m^2 c^2 kT} m_s = \frac{N}{4} \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2 kT} \mathcal{B}_0 \qquad (12-52)$$

وتكون المتأثرية المغنطيسية الموافقة لهذا الوسط :

$$\chi \equiv \frac{M}{\mathcal{B}_0} = \frac{e^2 \hbar^2 N}{4 m^2 c^2 kT} \qquad (12-53)$$

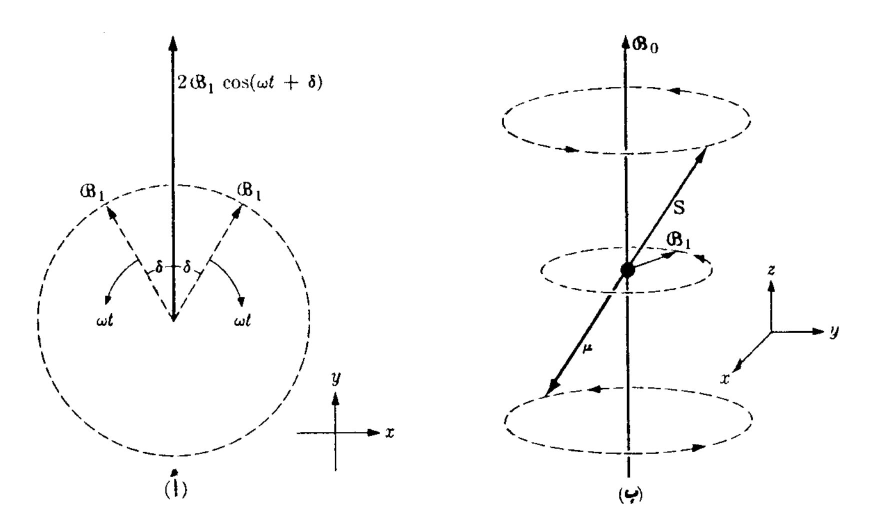
وبالاستفادة من الرابط بين المتأثرية المغنطيسية للوسط ونفاذيته ، نملك الصيغة التالية لأجل النفاذية :

$$\mu = 1 + 4\pi\chi = 1 + \frac{\pi e^2 \hbar^2}{m^2 c^2 kT} N \qquad (12-54)$$

وتتنبأ هذه الصيغة تنبؤاً دقيقاً بنفاذية المواد ذات المغنطيسية المسايرة البرمية ، وذلك كما هو حال بعض الجذور العضوية الحرة والمحاليل الأمونية للمعادن القلوية .

ولكي نعود إلى المسألة الحركية المتعلقة بالبرم في مجال مغنطيسي ساكن كبير ، يؤثر في مجال مغنطيسي تذبذبي ضعيف معامد له ، دعنا نفترض أن المجال المتحرك يتذبذب بتردد يساوي تقريبياً تردد المبادرة الخاص ببرم الالكترون في المجال الساكن . وإنه لمن الممكن استبدال المجال المغنطيسي التذبذبي بمجالين مغنطيسيين تذبذبيين يدوران في اتجاهين متعاكسين ، بحيث أن مجموع متجهي المجالين التذبذبيين يساوي متجهاً له اتجاه المجال التذبذبي الأصلي . وتؤخذ المجالات التذبذبية بحيث تقع في مستو معامد للمجال الساكن . وتكون مركبة المجال المغنطيسي ، التي تدور في الاتجاه نفسه الذي تجري فيه مبادرة برم الالكترون ، هي المركبة التي تلعب دوراً هاماً في

انتاج طاقة الانتقال من مستوى طاقي إلى مستوى طاقي آخر ، بينما ينجم عن المركّبة الأخرى نودان سريع بسيط فقط يقوم به محور البرم . وعليه ، سيجري تبسيط للشرح إذا نحن افترضنا أن المجال المغنطيسي الدوّار الأول هو وحده الموجود وتجاهلنا المجال الدوّار الثاني (انظر الشكل (12—4)). ويؤخذ المجال المغنطيسي الساكن ضمن الاتجاه الموجب للمحور Z ، بينما يقع المجال الدوّار في المستوي xy .



الشكل 12-4. أ) تفكيك المجال المغنطيسي التذبذبي المستقطب خطياً إلى مجالين مغنطيسيين دوارين متعاكسين. وتتفاعل فقط مركبة المجال الخطي التي تدور في اتجاه واحد مع مبادرة برم الالكترون مع العزم المغنطيسي بفاعلية، وهذا ما يتبين في الرسم ب)

تعطينا مفاعلة المجالين المغنطيسيين مع برم الالكترون الصيغة التالية لمؤثر هاملتون :

$$H = -\mu \cdot \mathcal{B} = \frac{e}{mc} (\mathcal{B}_0 S_z + \mathcal{B}_1 \cos \omega t S_x + \mathcal{B}_1 \sin \omega t S_y) \quad (12-55)$$

حيث أن اختيار B_1 بمثابة اتساع للمجال الدوّار يعني أن اتساع المجال التذبذبي هو $2B_1$. وانطلاقاً من المعادلة (12—32)سيتخذ مؤثر هاملتون وعبر التميز المصفوفي

الصيغة التالية :

$$\mathsf{H} = \frac{e\hbar}{2mc}\begin{bmatrix} \mathcal{B}_0 & \mathcal{B}_1 \exp(-i\omega t) \\ \mathcal{B}_1 \exp(i\omega t) & -\mathcal{B}_0 \end{bmatrix} \qquad (12-56)$$

وهذا مؤثر هاملتوني ذو تبعية صريحة للزمن ، فالطاقة ليست محفوظة . أما معادلة شرودينغر ، وضمن هذه الاعتبارات فهي أيضاً تملك صيغة فريدة ، بحيث أن على الدالة الموجية تحقيق المعادلة التالية :

$$\mathsf{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (12-57)$$

ومن الملائم البحث عن حلول لهذه المعادلة تسمى حلولاً عادية أو مستقرة ، أي حلولاً تكون بموجبها احتمالية العثور على الالكترون في كل من الحالتين الطاقيتين كمية ثابتة زمنياً . وتتمتع مثل هذه الحلول العادية بالشكل التالي :

$$\psi = \exp(i\lambda t)\begin{bmatrix} a_1 \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) \\ a_2 \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right) \end{bmatrix} \qquad (12-58)$$

ومن الواضح أن هذا حل مستقر بالمعنى الوارد أعلاه ، وذلك لأن الزمن يظهر فقط في العاملين الطوريين اللذين لهما معامل يساوي الواحد . وإذا افترضنا أن الحل يملك هذه الصيغة بالذات ، وعوضنا في المعادلة (12−57)، تكون النتيجة :

$$\frac{e\hbar}{2mc}\begin{bmatrix} (\mathcal{B}_0 a_1 + \mathcal{B}_1 a_2)\exp\left[i\left(\lambda - \frac{\omega}{2}\right)t\right] \\ (\mathcal{B}_1 a_1 - \mathcal{B}_0 a_2)\exp\left[i\left(\lambda + \frac{\omega}{2}\right)t\right] \end{bmatrix} \qquad (12-59)$$

$$= -\hbar\begin{bmatrix} a_1\left(\lambda - \frac{\omega}{2}\right)\exp\left[i\left(\lambda - \frac{\omega}{2}\right)t\right] \\ a_2\left(\lambda + \frac{\omega}{2}\right)\exp\left[i\left(\lambda + \frac{\omega}{2}\right)t\right] \end{bmatrix}$$

تمثل هذه المعادلة مساواة بين متجهين ـ عمودين ، فكل عنصر من عناصر العمود الأول يمكن مساواته مع العنصر الموافق في العمود الآخر ، مما يسفر عن المعادلتين :

$$[\lambda + \tfrac{1}{2}(\omega_0 - \omega)]a_1 + \tfrac{1}{2}\omega_1 a_2 = 0,$$
$$\tfrac{1}{2}\omega_1 a_1 + [\lambda - \tfrac{1}{2}(\omega_0 - \omega)]a_2 = 0 \qquad (12-60)$$

حيث تعرف ω_1 و ω_0 كالتالي :

$$\omega_1 \equiv \frac{e\mathcal{B}_1}{mc}, \qquad \omega_0 \equiv \frac{e\mathcal{B}_0}{mc} \qquad (12-61)$$

تشكل المعادلتان (60—12) جملة معادلتين متجانستين بمجهولين اثنين تتمتع بحل متميز عن الصفر فقط إذا تلاشى المعين المتكون من المعاملات :

$$\begin{vmatrix} \lambda + \frac{1}{2}(\omega_0 - \omega) & \frac{1}{2}\omega_1 \\ \frac{1}{2}\omega_1 & \lambda - \frac{1}{2}(\omega_0 - \omega) \end{vmatrix} = 0 \qquad (12-62)$$

ويقود حساب المعين إلى كثير الحدود المميّز :

$$\lambda^2 - \frac{1}{4}(\omega_0 - \omega)^2 - \frac{1}{4}\omega_1^2 = 0 \qquad (12-63)$$

والذي يملك لأجل λ الجذرين التاليين :

$$\lambda = \pm\frac{1}{2}\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \qquad (12-64)$$

ويمكن حل المعادلة الثانية في (60—12) لتعطي :

$$\begin{aligned} a_2 &= -\frac{2}{\omega_1}[\lambda + \tfrac{1}{2}(\omega_0 - \omega)]a_1 \\ &= -\frac{1}{\omega_1}[\pm\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} + (\omega_0 - \omega)]a_1 \end{aligned} \qquad (12-65)$$

وتمثل هاتان النتيجتان الدالتين الموجيتين الموافقتين للحالتين المستقرتين وذلك بالارتباط مع جذري λ . سوف يتم تبسيط المناقشة اللاحقة بقدر طفيف ، وذلك من خلال الافتراض بأن المجال الدوّار هو في الرنين تماماً ، أي أن تردده يساوي تماماً تردّد المبادرة العادية للبرم . وعندئذ يكون :

$$\omega = \omega_0 \qquad (12-66)$$

وتصبح المعادلة (64—12) كالآتي :

$$\lambda = \pm\frac{\omega_1}{2} \qquad (12-67)$$

وتؤول المعادلة (12−65) في هذه الحالة إلى :

$$a_2 = \mp a_1 \qquad (12-68)$$

ومن هذه العلاقات نجد أن الحلين العاديين لمسألة القيمة المميزة يساويان :

$$\psi_{\pm}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(\pm i\omega_1 t) \begin{bmatrix} \exp\left(\frac{-i\omega_0 t}{2}\right) \\ \mp \exp\left(\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \end{bmatrix} \qquad (12-69)$$

حيث تم اختيار a_1 على نحو يجعل ψ دالة مستنظمة .

سنقوم الآن بحساب الانتقال الطاقي من حالة طاقية إلى أخرى (ويسمى مثل هذا الانتقال من قبل الباحثين في ميادين الرنين النووي ورنين المغنطيسية المسايرة ، خفقات البرم) . ولنفترض أنه قد تم قياس برم الالكترون في لحظة $t = 0$ ، وتحدد أن اتجاهه مطابق تماماً للاتجاه الموجب للمحور Z . وفي هذه الحالة يكون للدالة الموجية الشكل التالي :

$$\psi(t = 0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (12-70)$$

لنختر تركيباً خطياً للحالتين المستقرتين اللتين أعطيتا في (12−69)بحيث يكون للدالة الناتجة هذا الشكل عندما (وفقط عندما) يكون الزمن $t = 0$. ويكون التركيب الخطي المطلوب هو :

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_+(t) + \psi_-(t)] \qquad (12-71)$$

وهذا ما يتخذ الشكل التالي إذا ما تم تسجيله بوساطة متجه ـ عمود :

$$\psi(t) = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\omega_0 t}{2}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \exp\left(\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \end{bmatrix} \qquad (12-72)$$

ومن الواضح وبعد التفحص أن هذه الدالة الموجية تكون في لحظة $t = 0$ على

نحو يجعل البرم موجهاً في الاتجاه الموجب للمحور Z ومن جهة أخرى ، تكون الدالة الموجية في لحظة زمن متأخرة $\omega_1 t = \pi$ على نحو يجعل المركبة Z من زخم البرم الزاوي مساوية $\frac{1}{2}\hbar$ -بكلمات أخرى يكون برم الالكترون قد « اندار » من الاتجاه المطابق لاتجاه Z الموجب إلى الاتجاه السالب . أما في وقت متأخر أكثر ($\omega t = 2\pi$) فإن برم الالكترون يكون موجّهاً من جديد في اتجاه Z الموجب ، أي أنه قد « خفق » مرة أخرى . وهكذا ، يمكن أن نرى أن برم الالكترون يخفق جيئة وذهاباً بين اتجاهي Z السالب والموجب ، وهنالك فترات زمنية بين هذه اللحظات لا يمكن فيها القول بالتحديد فيما إذا كان الالكترون موجّهاً باتجاه Z الموجب أو باتجاه Z السالب ، إذ توجد احتمالية لا تساوي الصفر لأن يسفر القياس عن قيمة أخرة لمركبة العزم .

ومن الجدير بالمناقشة موضوع صلاحية هذا الطراز من الحسابات ، والذي تم انجازه للتو . فقد جرت معالجة برم الالكترون بلغة ميكانيك الكم ، في حين أن مجال الاشعاع عولج ليس بعدّه نظاماً حركياً ، بل بعدّه مجال قوة معطى من الخارج ويؤثر في الجسيم . وبكلام مغاير ، لم تجر دراسة أية تأثيرات كماتية مرتبطة بمجال الاشعاع ذاته ، فمن الواضح أنه لا يمكن لاجراء كهذا أن يؤدي إلى فكرة الفوتونات . ويكون هذا الطراز الكلاسيكي من المعالجة صالحاً إذا كان هنالك الكثير من الفوتونات في المجال الكهرمغنطيسي ، بحيث أن المرء يتعامل مع أعداد كمية كبيرة جداً بالنسبة لهذا المجال . وبامكان مثل هذه المعالجة أن تصف وصفاً دقيقاً الانبعاث التحريضي عن نظام من الذرات أو مقدار امتصاص الطاقة من قبل نظام الذرات ، ولكنها لا تستطيع وصف مقدار الاشعاع التلقائي لذلك النظام ، لأن هذا مرتبط وبشكل صميمي مع التأثيرات الكماتية في المجال الكهرمغنطيسي . وتبينّ المعالجة التي تعمد إلى تكمية المجال المغنطيسي الدوار على النحو المناسب ، أن فوتوناً واحداً يتم إما امتصاصه من ، أو انبعاثه إلى ، المجال المذكور أثناء خفقات الالكترون .

وأخيراً ، فإن النتائج التي قد تم الحصول عليها لأجل برم منفرد يجب ربطها بتلك الحالة التي نملك فيها نظاماً متعدد الالكترونات . وكما رأينا في بداية هذه الفقرة ، فإن نظام الالكترونات ، التي تقع في توازن حراري مع محيطها وفي مجال مغنطيسي شدته B تتمتع بمغنطة حجمية اجمالية تعطى بالمعادلة (12−52) . وهذا ما يمكن عدّه ناجماً عن تجمع من N الكتروناً ، بينها عدد قدره :

$$N \exp\left(\frac{-e\hbar \mathcal{B}_0}{mckT}\right)\left[\exp\left(\frac{-e\hbar \mathcal{B}_0}{mckT}\right)+1\right]^{-1}$$

من الالكترونات التي برمها موجه بشكل معاكس للمجال Bo ، وتقع في حالة الطاقة العليا ، عند لحظة البداية وعدد قدره :

$$N\left[\exp\left(\frac{-e\hbar \mathcal{B}_0}{mckT}\right)+1\right]^{-1}$$

من الالكترونات التي برمها موجه بشكل معاكس للمجال B ويقع في حالة الطاقة الدنيا ، عند لحظة البداية . ويبين تحليل مماثل لذلك الذي أجري أعلاه لحالة البرم الموجه في البداية وفقاً للاتجاه السالب لمحور Z أن البرم المعاكس وعند لحظة البداية ، للبرم الموجه في الاتجاه السالب يبقى على حاله طوال عملية خفقان البرم . فالتشابك الابتدائي لزخوم البرم المغنطيسية يبقى على حاله تحت تأثير المجال التذبذبي ، ويمكن عد أن زخمي برم من هذا النوع « يتزاوجان ». تصنع فقط زخوم البرم المتبقية بعد التزاوج ، وعندما تكون مشغولة بعدد كبير من الزخوم ، المغنطيسية الصافية ، ويتمتع العزم المغنطيسي الصافي الناتج عن « فضل » زخوم البرم ، وفي حالة التوجه الابتدائية الموافقة لاتجاه Z الموجب ، بسلوك حركي مماثل لسلوك البرم المنفرد الذي عولج أعلاه ؛ وهكذا تتعرض المعنطيسية الحجمية الاجمالية لتعاقب الخفقات المشار إليه .

5−12 خلاصــــة .

استعرضنا في هذا الفصل التمثيل المصفوفي لمؤثرات الزخم الزاوي ، وذلك ابتداء من التمثيل القطري لـ L_z وL^2 ، وبالنسبة لمؤثرات الزخم الزاوي المداري . وتم خلال المعالجة استخدام الخواص الجبرية لهذه المؤثرات ، حيث جرى استخلاص تلك الخواص في وقت سابق . ثم عولجت حالة هامة وهي حالة النظام ذي البرم بشيء من التفصيل ، وتم الحصول على نموذج متجهي كلاسيكي لمثل هذا النظام . ولقد وجدنا أن الالكترونات تملك قريناً كماتياً لسلوك مبادرة الدوّام الكلاسيكي حول المجال المغنطيسي الساكن . وكما رأينا أن توصيف التأثير التذبذبي الضعيف المعامد للمجال الساكن وبلغة ميكانيك الكم ، هو التوصيف الكلاسيكس نفسه : يتعرض الالكترون لتعاقب « خفقات البرم »، بحكم أن برمه يندار بالنسبة للمجال الساكن

تلبية لعزم القوة المحركة المرتبط بالمجال التذبذبي . وأخيراً ، بيّنّا أن المغنطيسية الحجمية لمجموعة من زخوم البرم تسلك سلوك البرم المنفرد نفسه تماماً .

مسائل

12—1 أ) بيّن أن المصفوفة الجزئية (3x3) ، الخاصة بالمؤثر L_x ، وعندما (ℓ=1) ، تحقق المعادلة :

$$L_x(L_x + \hbar)(L_x - \hbar) = 0$$

ب) هل هذه المعادلة صالحة لأجل ℓ=2 ؟ جـ) هل تتحقق المعادلات الموافقة بالنسبة لـ L_y وL_z ؟ د) بيّن أنه فقط لأجل المصفوفة الجزئية (ℓ=1) تتحقق العلاقة :

$$\exp\left(\frac{i\theta L_x}{\hbar}\right) = (\cos\theta - 1)\frac{L_x^2}{\hbar^2} + i\sin\theta\cdot\frac{L_x}{\hbar} + 1$$

12—2 أ) بالانطلاق مباشرة من المعادلة (12—32)، بيّن أن المؤثرات S_x وS_y وS_z، وفي حالة الجسيمات ذات البرم $\frac{1}{2}$ ، تلبي قواعد التبادل الصحيحة . ب) بيّن أن هذه المؤثرات ضد ـ متبادلة ، وأن :

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} I$$

جـ) ماهي القيم المميزة والمتجهات المميزة لـ S_xوS_y ؟ د) بيّن أن :

$$S_xS_y = i\frac{\hbar}{2}S_z$$

هـ) ماهو S^2 .

12—3 إذا علمت أن كل مصفوفة من المصفوفتين σ_x و σ_y هرميتية وواحدية وغير شاذة ، وهما ضد ـ ضد متبادلتين . ناقش الخواص الموافقة بالنسبة للمصفوفتين $\sigma_+ = \sigma_x + i\sigma_y$ و $\sigma_- = \sigma_x - i\sigma_y$.

12—4 هناك جسيم يتمتع ببرم $\frac{\hbar}{2}$ ، وثمة قياس أجري للمركّبتين X وZ من زخم

البرم الزاوي الخاص به .

أ) ماهي النتائج الممكنة لهذا القياس ؟ ويتم ، وبعد إجراء هذا القياس ، قياس المركّبة y من البرم .

ب) احسب احتمالتي الحصول على النتيجتين $\pm \hbar/2$.

12−5 ترسل حزمة من الجسيمات ذات البرم $\hbar/2$ عبر جهاز شتيرن ـ غيرلاش ، الذي يجزىء الحزمة الساقطة إلى مركبتين منفصلتين فراغياً ، وذلك تبعاً للأعداد الكمية m_s المميزة للجسيمات . ويتم إزالة إحدى الحزمتين الناتجتين ، بينما ترسل الثانية عبر جهاز مشابه يكون مجاله المغنطيسي مائلاً بزاوية قدرها α بالنسبة لمجال الجهاز الأول . ماهما العددان النسبيان للجسيمات المتضمنة في الحزمتين الجديدتين الخارجتين من الجهاز الثاني ؟ استخلص النتيجة مستخدماً شكلانية باولي للبرم .

12−6 بيّن أن المؤثر الواحدي $\exp[(i/\hbar)\theta \boldsymbol{n}\cdot\mathbf{S}]$ يحقق المعادلة :

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\theta \boldsymbol{n}\cdot\mathbf{S}\right) = \cos\frac{\theta}{2} + i\,\frac{2\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{S}}{\hbar}\sin\frac{\theta}{2}$$

حيث : $\boldsymbol{n}$ متجه ثابت واحدي و $\mathbf{s} = \frac{1}{2}$. [توجيه : بيّن أولاً أن $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ ، حيث i وj وk هي المتجهات الواحدية على طول المحاور x وy وz ، بالترتيب .]

12−7 يقع جسيم ذو برم 1 وعزم مغنطيسي μ في مجال مغنطيسي شدته $\mathcal{B}$ ويتم في اللحظة $t = 0$ قياس مركبة البرم على طول المحور الذي يتقاطع مع المجال بزاوية قدرها θ ، ويتبين أنها تساوي $m\hbar$. ماهي احتمالية أن يؤدي تكرار القياس إلى قيمة مميزة $m\hbar$ علماً أن تلك الاحتمالية دالة تابعة زمنياً ؟ استخدم في البداية تمثيل شرودينغر ، ثم استخدم تمثيل هايزنبرغ بوساطة حساب القيمة المتوقعة لمؤثر الاسقاط المعني $\langle \hat{P}_{m'} \rangle$. (انظر المسألة 11−7).

12−8 أ) ناقش سلوك جسيم برمه $\frac{1}{2}$ خاضع لمجال مغنطيسي تذبذبي ضعيف معامد لمجال مغنطيسي ساكن قوي ، وذلك عندما يكون المجال التذبذبي في حالة الرنين . ب) ماهي الدالة الموجية للجسيم الذي يكون برمه في لحظة $t = 0$ في

اتجاه Z الموجب ؟

جـ) ماهو السلوك الكلاسيكي لبرم كهذا عندما يكون $T > 0$ ؟

12–9 عرف المؤثر

$$T^{1/2} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m}} \mathbf{P} \cdot \sigma$$

لأجل جسيم كتلته m حيث P مؤثر الزخم و σ معطاة عبر مؤثرات باولي . لاحظ أن $T^{1/2}$ يتبادل مع الطاقة الحركية $T = (1/2m)p^2 I$ ومع P . ب) بيّن بوضوح أن $T = (T^{1/2})^2$. جـ) بيّن أن $T^{1/2}$ له القيمتان المميزتان $\pm E^{1/2}$ ، حيث E هي الطاقة الحركية للجسيم . د) أوجد الدالات المميزة المشتركة للمؤثرات $T^{1/2}$ و T وP على شكل :

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \exp(ik \cdot r)$$

حيث a وb ثابتان . هـ) بيّن أن مؤثر التماثل يغير الحالة الذاتية لـ $T^{1/2}$ إلى الحالة الذاتية الأخرى ذات الاشارة المعاكسة .

الفصل الثالث عشر

التحويل بين التمثيلات

13−1 مدخـــل .

رأينا في الفصل الحادي عشر أنه يمكن أن يوجد عدد لانهائي من تمثيلات الشكلانية الخاصة بميكانيك الكم ووفقاً لاختيار الجملة التامة للدالات القاعدية . أما المسألة ، التي سندرسها الآن ، فهي كيف نعبر عن تمثيل ما بلغة جملة من الدالات القاعدية ، وذلك حين يكون التمثيل معروفاً بلغة جملة أخرى ، أي كيف نقوم **بالتحويل** بين تمثيلين ؟

لنأخذ تمثيلين مختلفين يرتكزان على جملتين u_k و v_j من الدالات المتعامدة المستنظمة :

$$v_j = \sum_k \overline{T_{jk}} u_k \qquad (13-1)$$

فإذا ضربنا طرفي هذه المعادلة بالتعبير الموافق لأجل $\overline{v_i}$ وأجرينا المكاملة في كل الفراغ ، نحصل على :

$$(v_i, v_j) = \sum_{l,k} T_{il}\overline{T_{jk}}(u_l, u_k) \qquad (13-2)$$

وبما أن الجملتين متعامدتان ومستنظمتان فإن هذا يؤول إلى :

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= \sum_{l,k} T_{il}\overline{T_{jk}}\, \delta_{lk} \\ &= \sum_k T_{ik}\overline{T_{jk}} \qquad (13-3) \end{aligned}$$

ويمكن ، وعبر ترميز المصفوفات ، كتابة هذه النتيجة على الشكل التالي :

$$I = TT^* \qquad (13-4)$$

مما يفترض أن القرين الهرميتي T^* للمصفوفة T يساوي مصفوفتها المقلوبة

T^{-1} ، أي أن المصفوفة T يجب أن تكون واحدية .
وإذا كان تمثيل الدالة الموجية ψ بوساطة الدالات القاعدية v_j دالة ψ' ذات عناصر هي :

$$\psi'_j = (v_j, \psi) \qquad (13-5)$$

فإن التعويض من $(13-1)$ يعطينا :

$$\psi'_j = \sum_k T_{jk}(u_k, \psi) = \sum_k T_{jk}\psi_k \qquad (13-6)$$

حيث ψ_k هو عنصر التمثيل المرتكز على u_k . ويمكن كتابة هذه المعادلة ، وعبر الترميز المصفوفي ، على الشكل التالي :

$$\psi' = T\psi \qquad (13-7)$$

ومن الواضح أن هذه هي معادلة التحويل المنشودة لأجل الدالة الموجية .
وعلى نحو مماثل ، فإن تمثيلاً ما للمؤثر Q يرتكز على الجملة v_j ، تكون له العناصر :

$$Q'_{ij} = (v_i, Qv_j) \qquad (13-8)$$

ومرة أخرى ، وباستخدام $(13-1)$ ، نحصل على :

$$\begin{aligned} Q'_{ij} &= \sum_{k,l} T_{ik}\overline{T_{jl}}(u_k, Q u_l) \\ &= \sum_{k,l} T_{ik}Q_{kl}T^*_{lj}, \end{aligned} \qquad (13-9)$$

أو أن :

$$Q' = TQT^* \qquad (13-10)$$

وذلك بمثابة التحويل المنشود للمؤثر Q . وبما أن T مصفوفة واحدية ، فإن ذلك يمكن كتابته على النحو التالي :

$$Q' = TQT^{-1} \qquad (13-11)$$

يسمى تحويل المصفوفة وفقاً للمعادلة $(13-11)$ **تحويلاً تماثلياً** . وإذا كانت المصفوفة

T واحدية ـ وكما سبقت الاشارة ـ فإن هذا التحويل يسمى **واحدياً** . إن المعادلات المصفوفية هي لا تغيّرية إزاء التحويل التماثلي . ولنأخذ ، مثلاً ، المعادلات :

$$\begin{aligned} W &= QR, \\ TWT^{-1} &= TQRT^{-1} = TQT^{-1}TRT^{-1} \\ W' &= Q'R' \end{aligned} \qquad (13-12)$$

يملك التحويل الواحدي الأكثر محدودية خواص لا يشاطره إياها التحويل التماثلي الأكثر عمومية . فمثلاً ، تبقى خاصة الهرميتية دون تغيير بعد التحويل الواحدي ، ولكن ذلك ليس صحيحاً بالضرورة بعد التحويل التماثلي العام ، ولكي نرى ذلك ، لنكتب القرين الهرميتي للمعادلة (13−11) :

$$Q'^* = T^{-1*}Q^*T^* \qquad (13-13)$$

نلاحظ أن ترتيب عوامل الجداء في الطرف الأيمن قد انقلب مع تشكيل القرين الهرميتي (انظر المعادلة (11−23) وبوسعنا رؤية ذلك من خلال كتابة المعادلة (13−11) على شكل مركّبات ، وأخذ القرائن الهرميتية مستفيدين من المعادلة (11−22)) . وبفرض أن T واحدية ، نجد أن المعادلة (13−13) تؤول إلى :

$$Q'^* = TQ^*T^{-1} \qquad (13-14)$$

وهكذا ، فإن التحويلات الواحدية للمصفوفات المتقاربة هي متقارنة أيضاً .

13−12 المثيل الهندسي ـ فراغ هيلبرت .

سوف نستعرض في هذه الفقرة مثيلاً هندسياً لشكلانية ميكانيك الكم ، وهو مثيل هام جداً . وإنه لمن الملائم التعبير عن المتجه العادي ثلاثي الأبعاد بلغة مركّباته الديكارتية ، ويمكن تمثيل ذلك بوساطة متجه ـ عمود :

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} \qquad (13-15)$$

إن التطبيق الخطي في الفراغ ثلاثي الأبعاد هو تحويل خطي يطبّق (يحول) المتجه a عبر متجه آخر a وبما يتفق مع :

$$a' \equiv Ra \qquad (13-16)$$

حيث : R مصفوفة مربعة (3x3). ويكون التوافق بين هذا التطبيق في الفراغ ثلاثي الأبعاد والتحويل الذي يتعرض له تمثيل المتجه الموجي المعطى بالمعادلة (7—13) واضحاً هنا ، وبناءً عليه ، من المفيد غالباً تناول الدالة الموجية في ميكانيك الكم على شكل متجه حالة ضمن الفراغ المتجهي الملائم . ويجب على هذا الفراغ المتجهي ، ولكي يكون ملائماً لشكلانية ميكانيك الكم عادةً ، أن يكون عقدياً وذا عدد لانهائي من الأبعاد (بمعنى أن مركّبات المتجهات قد تكون أعداد عقدية). ويسمى مثل هذا الفضاء فراغاً هيلبرتياً أوداليّاً .

هناك توافق مؤثرات محددة ، وكذلك متجهات معينة ، بين الفراغ الهندسي ثلاثي الأبعاد والفراغ الهيلبرتي . فبالتوافق مع الجداء السلمي لمتجهين عاديين (انظر الشكل (1—13)):

$$a \cdot b = ab\cos\theta = \tilde{a}b = (a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3) \qquad (13-17)$$

وهناك الجداء السلمي لدالتين عقديتين ψ و ψ'. ويمكن التعبير عن هذا الجداء المعرف بـ (ψ', ψ) من خلال التمثيل المصفوفي :

$$(\psi', \psi) = \sum_{j,k} \overline{\psi'_j}\psi_k(u_j, u_k) = \sum_j \overline{\psi'_j}\psi_j \qquad (13-18)$$

$$= \psi'^*\psi$$

ويقال عن متجهين عاديين ثلاثيي الأبعاد إنهما متعامدان ، عندما :

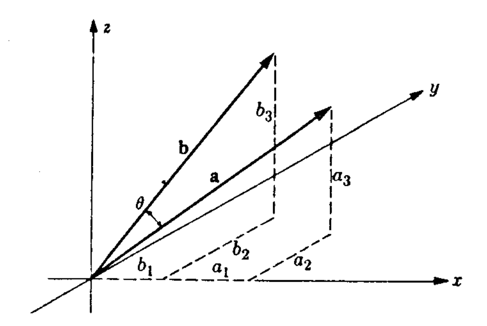
$$a \cdot b = \tilde{a}b = a^*b = 0 \qquad (13-19)$$

والشرط الموافق بالنسبة للمتجهات في الفراغ الهيلبرتي هو تلاشي المعادلة (18—13)، أي أن :

$$\psi'^*\psi = 0 \qquad (13-20)$$

ويتمتع المتجه العادي بطول أحادي عندما :

$$a \cdot a = \tilde{a}a = a^*a = 1 \qquad (13-21)$$



الشكل $13-1$: العلاقات الهندسية في الجداء السلمي للمتجهتين $\vec{b},\vec{a}$.

والشرط الموافق في الفراغ الهيلبرتي هو كون الدالة ψ مستنظمة :

$$(\psi, \psi) = \psi^*\psi = 1 \qquad (13-22)$$

إن أحد التطبيقات الخطية الهامة للمتجهات ثلاثية الأبعاد هو التطبيق الموافق للدوران الصارم من قبل منظومة متجهات بالنسبة للإحداثيات ، أو الموافق لدوران محاور الإحداثيات عندما تكون منظومة المتجهات مثبتة ، مما يعني الأمر ذاته . وينقل مثل هذا الدوران الصارم منظومة المتجهات القاعدية المتعامدة إلى منظومة متعامدة أخرى . كذلك ، فإن تحويلاً خطياً كهذا يمكن تمييزه على وجه التخصيص بالمطالبة بأن يبقى الجداء السلمي لأي متجهين دون تغيير ، والتطبيق له في الفراغ الهيلبرتي هو تحويل التمثيل من جملة دالات قاعدية متعامدة ومستنظمة u_j إلى جملة أخرى v_j .

هنا نجد أن :

$$\psi = \sum_j \psi_j u_j \qquad (13-23)$$

حيث ψ_j مركبات المتجه العقدي ψ . والانتقال إلى أساس ذي دالات قاعدية v_j عبر تحويل واحدي ، وذلك بما ينسجم مع النقاش السابق (انظر المعادلة $(13-7)$):

$$\psi' = T\psi \qquad (13-24)$$

إن الجداء السلمي لمتجهي الحالة a وb هو :

$$(a', b') = a'^* b' \qquad (13-25)$$

وبتطبيق التحويل المعطى في المعادلة (13—24):

$$a' = Ta, \quad b' = Tb \qquad (13-26)$$

يصبح الجداء السلمي كالآتي :

$$a'^* b' = (Ta)^* Tb = a^* T^* Tb = a^* b \qquad (13-27)$$

ولأن T واحدية .

وهكذا فإن الجداءات السلمية تكون لا تغيرية إزاء التحويل الواحدي ، وعليه ، يمكن عدّ مثل هذا التحويل دوراناً للإحداثيات في الفراغ الهيلبرتي . ويكون هذا الأمر حيوياً بالنسبة لتماسك الشكلانية ، إذ من الواضح أن القيمة المتوقعة لأي مؤثر Q ، $(\psi, Q\psi)$ ، والقابلة للقياس فيزيائياً ، هي جداء سلمي ويجب أن تكون لا تغيرية إزاء اختيار الدالات القاعدية ، فيما إذا تم إضفاء المدلول الفيزيائي المفترض على مثل هذا التعبير .

ويجب أن نلاحظ من المعادلة (13—27) أن التحويل الواحدي يبقي على الطابع التعامدي للمتجهات ، فالجملة المتعامدة من المتجهات المستنظمة تبقى كذلك بعد التحويل الواحدي أيضاً .

هناك فارق هام وذو مغزى بين عمليتي الدوران في الفراغ المتجهي الفعلي وفي الفراغ الهيلبرتي . ففي الفراغ المتجهي الفعلي ، يجب تقسيم دورانات الاحداثيات (وبكلام ملائم أكثر : التحويلات التعامدية) إلى صنفين : الدورانات العادية أو الحقيقية و« الدورانات » المعتلّة . فالدوران المعتل يعكس نظام الاحداثيات اليميني إلى نظام إحداثيات يساري ، ولكن هذا التمييز غير موجود بالنسبة للفراغ الهيلبرتي . وجميع التحويلات الواحدية هي مجرد « دورانات ».

13—3 معادلات القيمة المميزة :

إن معادلة القيمة المميزة هي :

$$Q\psi_j = q_j\psi_j \qquad (13-28)$$

وعندما يتم التعبير عنها ومن خلال التمثيل المصفوفي فإنها تؤول إلى :

$$Q\psi_j = q_j\psi_j \qquad (13-29)$$

تمثل هذه المعادلة جملة متجانسة من المعادلات الخطية التي تملك حلاً متميزاً عن الصفر لأجل ψ_j في فراغ نهائي الأبعاد ، إذاً وفقط إذا كان معين المعاملات يساوي الصفر :

$$\det [Q - qI] = 0 \qquad (13-30)$$

حيث جرى إهمال دلائل q لأجل السهولة . وإذا كان الفراغ (النهائي) ذا n بعداً ، فإن هذه المعادلة ، وبعد نشر المعين ، تؤول إلى كثير حدود من المرتبة n بالنسبة للمتحول q :

$$q^n + c_1 q^{n-1} + \cdots + c_n = 0 \qquad (13-31)$$

وهي معروفة بإسم كثير الحدود المميّز . وإذا رمزنا إلى n جذراً تملكها هذه المعادلة بـ q_i ، يمكننا كتابة كثير الحدود على شكل جداء معاملات :

$$(q - q_1)(q - q_2) \cdots (q - q_n) = 0 \qquad (13-32)$$

من هنا يمكن رؤية أن :

$$c_1 \equiv -\sum_i q_i,$$
$$c_n \equiv (-1)^n \prod_i q_i = (-1)^n q_1 q_2 q_3 \cdots q_n \qquad (13-33)$$

كما يمكن أن نلاحظ مباشرة ، ومن خلال نشر المعين (30-13)، أن أثر (أو ذيل) المصفوفة Q ، والذي يعرف على أنه مجموع عناصرها القطرية ، يعطى بالعلاقة التالية :

$$\mathrm{tr}\, Q \equiv \sum_i Q_{ii} = -c_1 = \sum_i q_i \qquad (13-34)$$

ويساوي مجموع القيم المميزة لـ Q . وعلى نحو مماثل ، يعطى معين المصفوفة Q

بالعلاقة :

$$\det Q = (-1)^n c_n = q_1 q_2 \cdots q_n \qquad (13-35)$$

وهو يساوي جداء القيم المميزة لـ Q .

تبقى معادلة القيمة المميزة (13−28) دون تغير في شكلها بعد التحويل التماثلي ، وهو ما يمكن تبيانه بحجج مشابهة لتلك التي قادتنا إلى المعادلات (13−12) ومن هنا ، فإن القيم المميزة لا تغيرية ، مما يقتضي لا تغيرية كثير الحدود المميز ، أيضاً وأن معاملات كثير الحدود هذا بما فيها الأثر c_1 ــ ، لا تتعرض للتغير بنتيجة التحويلات التماثلية . ويكون معين المصفوفة هو الآخر ـ وبناءً على (13−30)ـ لا تغيرياً .

يمكننا كتابة معادلة القيمة المميزة (13−29) للمصفوفة على الشكل التالي :

$$QT = TQ_d \qquad (13-36)$$

حيث : T مصفوفة من قياس n × n لها n عموداً ψ_j و Q_d هي مصفوفة قطرية من قياس n × n ، لها العناصر :

$$(Q_d)_{ij} = q_i \, \delta_{ij} \qquad (13-37)$$

ويمكن بالنسبة للمصفوفة الهرميتية Q اختيار المتجهات ψ_j دائماً ، بحيث تشكل جملة متعامدة ومستنظمة . وبفرض أن هذا الاختيار قد تم ، نجد أن :

$$T^*T = I \qquad (13-38)$$

وأن :

$$T^*QT = Q_d \qquad (13-39)$$

وبناءً عليه ، يمكن إحالة أية مصفوفة هرميتية Q إلى مصفوفة قطرية بوساطة هذا التحويل الواحدي ، وستظهر القيم المميزة لـ Q على قطر المصفوفة Q_d .

13−4 الخواص الزمرية للتحويلات الواحدية .

إن تحويلين واحديين يتم تطبيقهما على التوالي ، مكافئان لتحويل واحدي ثالث منفرد ، وهو الذي يتم تعريفه على أنه التحويل ـ الجداء ومثل هذا الجداء تجميعي .

ويوجد التحويل الوحيد ، وهو يحول أية مصفوفة واحدية (ذات قياس متساو) إلى نفسها . وبالإضافة إلى ذلك ، ولأجل أي تحويل T ، يوجد تحويل مقلوب ، بحيث أن $TT^* = I$. تلك هي الخواص الجبرية **للزمرة** ، ويقال عن جملة جميع التحويلات الواحدية في الفراغ ذي الـ n بعداً إنها تشكل زمرة .

13-5 المصفوفات المتصلة :

كانت مناقشة تحويلات التمثيل تتناول حتى الآن فقط الجمل المتقطعة من الدالات القاعدية . أما في هذه الفقرة فسندرس كيف تسلك المصفوفات المتصلة أثناء التحويلات .

إن أحد التمثيلات ذات الأهمية المفروضة هو **تمثيل فورييه** ، وقد سبق لنا أن ناقشنا جوانب بسيطة معينة من هذا التمثيل في الفصل الرابع وسوف نستخدم أفكاراً هندسية بدلاً من متابعة الطرائق التي استخدمت هناك . لنستخدم ، أولاً ، التمثيل الموضعي القطري (المعادلة (11-69))، ونستفيد أثناء ذلك من تمثيل واحدي (الدوران في الفراغ الهيلبرتي)، وذلك بقصد تحويل التمثيل إلى تمثيل يكون مؤثر الزخم فيه قطرياً . ويمكن في التمثيل الموضعي القطري النظر إلى مؤثر الزخم :

$$\mathbf{P} = -i\hbar\nabla \qquad (13-40)$$

بمثابة مصفوفة متصلة ، عناصرها هي :

$$P(r, r') = \mathbf{P}\,\delta(r - r') \qquad (13-41)$$

وانطلاقاً من النقاش بصدد المعادلة (13-36) فإن المصفوفة الواحدية المنشودة هي المصفوفة U التي تتكوّن أعمدتها من الدالات المميزة للمؤثر P المستنظمة . وهذا ما عرضناه سابقاً (المعادلة (6-50)) لأجل حالة البعد الواحد ، بينما الدالات المميزة ذات الأبعاد الثلاثة هي :

$$U(r, p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{ip\cdot r}{\hbar}\right) \qquad (13-42)$$

وهذا هو تعريف المصفوفة U اللانهائية ، والتي يشار إلى أعمدتها بـ p وإلى أسطرها بـ r ويتكون القرين الهرميتي لـ U من عناصر هي المترافقات العقدية لـ (13-42) على أن يشار الآن بـ p وr إلى الأسطر والأعمدة بالترتيب . ونستطيع وبالاستفادة من

المعادلة (13—39) جعل P قطرية بوساطة هذا التمثيل الواحدي . وفي هذا التمثيل تتكون المصفوفة P ، والتي يشار إليها بالدليل (†) ، أي بالترميز $(P^\dagger)$ ، من العناصر التالية :

$$
\begin{aligned}
P^\dagger(p, p') &= \int \overline{U}(r, p)[-i\hbar\nabla]\,\delta(r - r')U(r', p')\,dr\,dr' \\
&= \int \overline{U}(r, p)[-i\hbar\nabla]U(r, p')\,dr \\
&= p'\int \overline{U}(r, p)U(r, p')\,dr \\
&= p'\,\delta(p - p') \\
&= p\,\delta(p - p')
\end{aligned}
\tag{13-43}
$$

ومن الواضح أن هذه مصفوفة قطرية .

وبأسلوب مماثل ، سنجد أن مصفوفة الموضع Rt في التمثيل الزخمي هذا لها العناصر التالية :

$$
\begin{aligned}
R^\dagger(p, p') &= \int \overline{U}(r, p)r\,\delta(r - r')U(r', p')\,dr\,dr' \\
&= \int \overline{U}(r, p)rU(r, p')\,dr \\
&= \int i\hbar\nabla_p\overline{U}(r, p)U(r, p')\,dr
\end{aligned}
\tag{13-44}
$$

حيث أن مؤثر التدرج $\vec{\nabla}$ يؤثر في $\vec{p}$ في الفراغ الزخمي . لذلك يمكن إخراج هذا المؤثر خارج رمز التكامل ، الذي يؤول عندئذ إلى $\delta(p - p')$ ، مما يعطي العلاقة التالية :

$$R^\dagger(p, p') = i\hbar\nabla_p\,\delta(p - p') \tag{13-45}$$

أما الدالة الموجية في التمثيل الزخمي القطري فيتم الحصول عليها من التحويل الواحدي نفسه :

$$\psi^\dagger(p) = \int \overline{U}(r, p)\psi(r)\,dr \tag{13-46}$$

وهذا مكافىء لمعادلة المصفوفات التالية :

$$\psi^\dagger = U^*\psi \tag{13-47}$$

وبالتأثير في الطرف الأيسر بوساطة U نجد أن :

$$U\psi^{\dagger} = UU^{*}\psi = \psi \qquad (13-48)$$

ويمكن على مستوى المركبات كتابة هذه المعادلات كالآتي :

$$\psi(r) = \int U(r, p)\psi^{\dagger}(p)\, dp \qquad (13-49)$$

ويتكون جداء المؤثر r والدالة الموجية $\psi(r)$ في التمثيل الزخمي ، أي $R^{\dagger}\psi^{\dagger}$ من المركبات التالية :

$$\begin{aligned}[R^{\dagger}\psi^{\dagger}](p) &= \int i\hbar\nabla_p\, \delta(p - p')\psi^{\dagger}(p')\, dp' \\ &= i\hbar\nabla_p\psi^{\dagger}(p)\end{aligned} \qquad (13-50)$$

وهذه قاعدة حساب تقريبي بسيطة للانتقال من التمثيل الموضعي إلى التمثيل الزخمي : أي استبدال الدالة الموجية بصيغة فورييه الخاصة بها واستبدال مؤثر الزخم بقيمته (p) واستبدال مؤثر الموضع بـ $i\hbar\nabla_p$.

سوف نختتم هذه الفقرة بدراسة شكل هام من تمثيل هايزنبرغ الذي يكون موضعياً قطرياً في لحظة $t = 0$. فسبب تبعية المؤثرات للزمن (انظر الفصل الحادي عشر) لا تبقى المؤثرات على شكلها القطري ، وسوف يستخدم تحويل واحدي للانتقال من تمثيل شرودينغر الموضعي القطري إلى تمثيل هايزنبرغ . وسنفترض فيما يلي أن مؤثر هاملتون لا يتضمن متغير الزمن بشكل صريح .

لنتذكر أن تمثيل هايزنبرغ يتصف بدالات موجية مستقلة زمنياً . ومن الضروري ، ولهذا السبب ، إيجاد تحويل واحدي يحول $\psi(r, t)$ ، كونها حلاً لمعادلة شرودينغر :

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (13-51)$$

إلى دالة تابعة للزمن وللموضع r . وإذا كان التمثيل موضعياً قطرياً في اللحظة t=o يتوجب على التحويل الواحدي أن ينحصر عندما $t = 0$ في تحويل التطابق I .

ويبدو أن المؤثر $\exp(iHt/\hbar)$ المنشور عبر السلسلة

$$\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) \equiv I + \frac{iHt}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)^2 + \cdots \qquad (13-52)$$

هو مؤثر واحدي . فالقرين الهرميتي له هو $\exp(-i\mathrm{H}t/\hbar)$ والذي يشكل في الوقت ذاته المؤثر المقلوب . والأكثر من ذلك ، أن هذا التحويل الذي ينحصر في تحويل التطابـق عندما $t = 0$ سوف يعطي النتيجة المرغوبة . وبهدف رؤية ذلك سننشر ψ بلغة الدالات المميزة للطاقة :

$$\psi = \sum_j c_j \exp\left(-\frac{iE_j t}{\hbar}\right) u_j(r) \qquad (13-53)$$

وإذا طبقنا المعادلة $(13-52)$ في u_j سنجد أن :

$$\exp\left(\frac{i\mathrm{H}t}{\hbar}\right) u_j = \exp\left(\frac{iE_j t}{\hbar}\right) u_j \qquad (13-54)$$

وذلك لأن الطرف الأيمن من $(13-52)$ وبتأثيره في u_j ، يسفر عن سلسلة قوى هي نشر للطرف الأيمن في المعادلة $(13-52)$.

وبناءً عليه ، إذا أثر المؤثر من المعادلة $(13-52)$ في الدالة الموجية في المعادلة $(13-53)$ فتكون النتيجة هي :

$$\psi'(r) = \psi(r, 0) = \exp\left(\frac{i\mathrm{H}t}{\hbar}\right) \psi(r, t) \qquad (13-55)$$

أو ، بالعكس :

$$\psi(r, t) = \exp\left(-\frac{i\mathrm{H}t}{\hbar}\right) \psi(r, 0) \qquad (13-56)$$

ويتحول المؤثر Q الموضعي القطري (أي التفاضلي) وبناء على المعادلة $(13-10)$ إلى :

$$\mathrm{Q}' = \exp\left(\frac{i\mathrm{H}t}{\hbar}\right) \mathrm{Q} \exp\left(-\frac{i\mathrm{H}t}{\hbar}\right) \qquad (13-57)$$

ومن هنا ، فإن التمثيل القطري في لحظة $t = 0$ يمكن استحصاله على الشكل التالي :

$$Q^{\dagger}(p, p') = \int \overline{U}(r, p) \mathrm{Q}' U(r, p')\, dr \qquad (13-58)$$

13-6 التحويلات القانونية .

لقد رأينا أن التحويلات الواحدية تمثل علاقات بين الاحداثيات في فراغ عقدي

(لا نهائي الأبعاد في الحالة العامة) يتضمن الدالة الموجية بمثابة متجه . ويبقى المدلول الفيزيائي للدالة الموجية دون تغيير إثر تحويل كهذا ، فما يجري هو فقط التعبير عن الدالة الموجية بلغة نظام إحداثيات آخر . وعلى نحو مماثل ، لا يتعرض للتغير المدلول الفيزيائي للمؤثرات التي تمثل ملحوظات عندما تخضع للتحويلات الواحدية .

ولكن ماورد أعلاه ليس التفسير الوحيد الذي يمكن إعطاؤه للتحويل الواحدي . فإذا كان يجري تحويل الدالة الموجية ψ' إلى ψ بوساطة تحويل واحدي T ، أي :

$$\psi' = T\psi \qquad (13-59)$$

ودون أن تتعرض للتحويل المؤثرات التي تمثل الملحوظات ، فإن عملية التحويل يمكن تفسيرها بمثابة تغيير في حالة النظام . وبشكل مماثل ، إذا تم تطبيق التحويل الواحدي T على المؤثرات Q ، ودون تطبيقه على الدالة الموجية ، فيمكن تفسير التحويل بمثابة استبدال للمؤثرات Q بمؤثرات أخرى Q توافق كميات فيزيائية مختلفة . وهذا التحويل هو مثال على **التحويلات القانونية** .

لنأخذ مثلاً تأثير التحويل الواحدي :

$$T = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{P}\cdot a\right) \qquad (13-60)$$

حيث a متجه ثابت على المؤثر r . ويكون المؤثر المحوَّل هو :

$$r' = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{P}\cdot a\right) r \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{P}\cdot a\right) \qquad (13-61)$$

وبما أن :

$$\mathbf{P} = i\hbar\nabla \qquad (13-62)$$

نجد أن :

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{P}\cdot a\right) = \exp\,(a\cdot\nabla) \qquad (13-63)$$

وإذا نشرنا هذا المؤثر كما في المعادلة (52—13) وجعلناه يؤثر في دالة اختيارية f(r)، فسنحصل على العلاقة :

$$\exp(a \cdot \nabla) f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a \cdot \nabla)^n}{n!} f(r) \qquad (13-64)$$

ويمكن التعرف إلى الطرف الأيمن في هذه المعادلة على أنه بسلسلة تايلور لنشر الدالة $f(r+a)$ حول النقطة $\mathbf{r}$:

$$f(r+a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a \cdot \nabla)^n}{n!} f(r) \qquad (13-65)$$

من هنا نجد أن مؤثر الموضع (13−61)، وبعد تحويله ، يعطى بالعلاقة :

$$\begin{aligned} r' f(r) &= \exp(a \cdot \nabla) r \exp(-a \cdot \nabla) f(\mathbf{r}) \\ &= \exp(a \cdot \nabla)[r f(r-a)] \\ &= (r+a) f(r-a+a) \\ &= (r+a) f(r) \end{aligned} \qquad (13-66)$$

أو :

$$r' = r + a \qquad (13-67)$$

أما مؤثر الموضع ذو الشكل $\mathrm{g}_{(r)}$ فيصبح :

$$g'(r) = g(r+a) \qquad (13-68)$$

وذلك انطلاقاً من الاعتبارات نفسها .

ومن ناحية أخرى ، يبقى هذا التحويل على مؤثر الزخم P دونما تغيير .

$$\begin{aligned} \mathrm{P}' &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathrm{P} \cdot a\right) \mathrm{P} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathrm{P} \cdot a\right) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathrm{P} \cdot a\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathrm{P} \cdot a\right) \mathrm{P} = \mathrm{P} \end{aligned} \qquad (13-69)$$

ومن الواضح أن هذا التحويل قد قام بمجرد نقل المؤثرات في الفراغ المكاني العادي ، ولذلك يمكن عدّه انتقالاً في الفراغ العادي أكثر من كونه دوراناً في الفراغ الهيلبرتي . وإذا تم تطبيق التحويل على الدالة الموجية أيضاً ، فيمكن عدّه مجرد نقل

للمؤثرات والدالة الموجية في آن واحد .

يمكن استخدام التحويلات القانونية اللامتناهية في الصغر لأجل الدلالة على أهمية أقواس بواسون في الميكانيك الكلاسيكي ، والتي لها قرائنها في ميكانيك الكم . وكما بيّنا في الفصل الخامس ، فإن قوس بواسون لأجل ثابت الحركة ودالة هاملتون التي تصف النظام $\{G,H\}$ يساوي الصفر ، وبذلك فإن تلاشي قوس بواسون يضمن لنا طريقة لايجاد ثوابت الحركة ، وبالتالي إيجاد الحل المطلوب للمسألة الحركية . وإضافة إلى ذلك ، وكما سنبين أدناه ، إذا كانت $G(q_i, p_i)$ هي دالة التوليد بالنسبة للتحويل القانوني اللامتناهي في الصغر ، فإن تلاشي $\{G,H\}$ يقتضي أن تكون دالة هاملتون لا تغيرىي إزاء التحويل المذكور . وبما أن خواص التناظر هي التي تحدد عادةً أية تحويلات بالذات تبقي على دالة هاملتون بلا تغيير (فإذا كان النظام متناظراً خلال عملية معينة ، فمن الواضح أن دالة هاملتون يجب أن لا تتأثر بسبب تلك العملية !) وغالباً ما يمكن الحصول مباشرة على ثوابت الحركة انطلاقاً من التناظر .

لقد رأينا في الفصل الخامس أن التغييرات اللامتناهية في الصغر في المتغيرات المترافقة قانونياً يمكن توليدها كلاسيكياً بوساطة دالة توليد $G(q_i, p_i)$ ، بحيث تكون المتحولات الجديدة $q_i + \delta q_i$ و $p_i + \delta p_i$ قانونية هي أيضاً . ووفقاً للشرح السابق تكون التغييرات كالآتي :

$$\delta q_i = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}, \qquad \delta p_i = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \qquad (13-70)$$

حيث : ϵ ثابت لا متناه في الصغر و $G(q_i, p_i)$ أية دالة قابلة للاشتقاق .

إن أية دالة W تتعرض إثر هذا التحويل لتغير مقداره δW ، حيث

$$\delta W = \epsilon\{W, G\} \qquad (13-71)$$

إذا جعلنا W بمثابة دالة هاملتون H ، نحصل على النتيجة الواردة سابقاً ، وهي العلاقة التالية :

$$\delta H = \epsilon\{H, G\} \qquad (13-72)$$

والتي تبين أنه طالما القوس $\{H,G\}$ يتلاشى لأجل ثابت الحركة (راجع الفصل

الخامس)، فإن ثابت الحركة هذا ، وعندما يلعب دورالدالة المولدة للتحويل القانوني اللامتناهي في الصغر ، يترك دالة هاملتون دون تغيّر .

يمكن نقل النتيجة السابقة إلى ميكانيك الكم بالاستفادة من العلاقة بين قوس بواسون الكلاسيكي والمبادل في ميكانيك الكم (الفرضية 7 في الفصل السادس):

$$\delta W = \frac{i\epsilon}{\hbar}[G, W] \equiv \frac{i\epsilon}{\hbar}(GW - WG) \qquad (13-73)$$

من الواضح أن المدلول الفيزيائي هو نفسه في ميكانيك الكم والميكانيك الكلاسيكي .

والآن سنورد عدة من أمثلة بسيطة على التحويلات الملاصقة اللامتناهية في الصغر . فإذا كانت دالة التوليد هي :

$$G = p_j \qquad (13-74)$$

فإن التحويل هو نقل مكاني معمّم لامتناه في الصغر :

$$\delta q_i = \epsilon\delta_{ij}, \quad \delta p_i = 0 \qquad (13-75)$$

وبالمثل ، إذا كان :

$$G = -q_j \qquad (13-76)$$

فإن :

$$\delta q_i = 0, \quad \delta p_i = \epsilon\delta_{ij} \qquad (13-77)$$

هذان هما مثالان على صنف هام التحويلات . وفي ظل تحويلات كهذه يتغير مؤثر هاملتون بمقدار :

$$\delta H = \frac{i\epsilon}{\hbar}[G, H] \qquad (13-78)$$

وإذا حدث استناداً إلى تناظر في النظام الفيزيائي أن تكون الطاقة لاتغيرية إزاء التحويل ، فإن SH يجب أن يساوي الصفر . ومن ناحية أخرى ، ينتج عن معادلة الحركة (8−14) أن :

$$\frac{d}{dt}\langle G\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H, G]\rangle \qquad (13-79)$$

(وذلك بفرض أن G ليست دالة صريحة التبعية للزمن). وهكذا ،إذا تلاش δH

فيجب أيضاً أن يتلاشى $(d/dt)\langle G\rangle$ ، ويجب أن يكون ممكناً ، وبالانطلاق من اعتبارات التناظر وحدها ، اختيار جملة ثوابت الحركة كما ذكرنا أعلاه .

ثمة مثال آخر على دالة توليد النقل المكاني هو دالة هاملتون ذاتها . فانطلاقاً من المعادلة (13−70) ومعادلات هاملتون :

$$\begin{aligned} \delta q_i &= \epsilon \frac{\partial H}{\partial p_i} = \epsilon \dot{q}_i, \\ \delta p_i &= -\epsilon \frac{\partial H}{\partial q_i} = \epsilon \dot{p}_i \end{aligned} \qquad (13-80)$$

يجب أخذ ϵ اللامتناهية في الصغر على شكل :

$$\epsilon = \delta t \qquad (13-81)$$

وعندئذ تؤول المعادلة (13−73) إلى :

$$\delta W = \frac{i}{\hbar}\, \delta t [H, W] \qquad (13-82)$$

ويمكن تفسير التغير δW على أنه عملية نقل زمني بمقدار δt (مع الافتراض بأن W ليست دالة صريحة التبعية للزمن).

وكمثال أخير ، لنأخذ الدوران اللامتناهي في الصغر ، والذي يتم توليده بوساطة :

$$G = J_z \qquad (13-83)$$

حيث : J_z هي المركبة Z الاجمالية للزخم الزاوي الخاص بالنظام . يولّد التحويل التغيرات التالية في الإحداثيات الديكارتية لموضع أي جسيم (انظر المعادلتين (2−9) و(13−73)) :

$$\begin{aligned} \delta x &= \delta\phi\, \frac{i}{\hbar} [J_z, x] = -\delta\phi\, y, \\ \delta y &= \delta\phi\, \frac{i}{\hbar} [J_z, y] = \delta\phi\, x, \\ \delta z &= \delta\phi\, \frac{i}{\hbar} [J_z, z] = 0 \end{aligned} \qquad (13-84)$$

ومن الواضح أن J_z يولد دوران النظام ككل بزاوية قدرها $\delta\phi$ حول المحور Z .
لنأخذ أي متجه T يتغير أثناء دوران الإحداثيات كما يتغير r . فإنه عندئذ يجب أن يحقق المعادلة :

$$\begin{aligned}\delta T_x &= \delta\phi \frac{i}{\hbar}[J_z, T_x] \\ &= -\delta\phi T_y\end{aligned} \qquad (13-85)$$

والخ .

إن من غير الضروري حساب المبادلات طالما أنها تنتج عن المدلول الهندسي للدوران اللامتناهي في الصغر . وهذه النتائج على وفاق ، بطبيعة الحل ، مع تلك التي أسفرت عنها المعادلة (9−81) إذ أن T ينتمي إلى الصف T .

لنعد الآن إلى المعادلة (13−73) فإذا تجاهلنا المقادير اللامتناهية في الصغر ذات المراتب الأعلى ، يمكننا كتابتها كالآتي :

$$W' = W + \delta W = \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} G\right) W \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} G\right) \qquad (13-86)$$

ونجد هنا أن المؤثر $1 + (i\epsilon/\hbar)\, G$ هو مؤثر واحدي في المرتبة الأولى من ε ، والمؤثر G المضمن فيه هرميتي بموجب الافتراض الأصلي . هذه المعادلة إذاً تحويلاً واحدياً لا متناهياً في الصغر تخضع له W . وإذا كررنا هذا التحويل n مرة ، فيكون :

$$W'' = \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} G\right)^n W \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} G\right)^n \qquad (13-87)$$

وعند المرور إلى النهايتين $n \to \infty$ و $n\varepsilon \to a$ ، نجد أن :

$$\left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} G\right)^n \to \exp\left(\frac{ia}{\hbar} G\right) \qquad (13-88)$$

وهذا مؤثر واحدي يولّد تحويلاً نهائياً ، والأمثلة على تحويلات كهذه لا متناهية في الصغر ومكررة هي التحويل $\exp(iHt/\hbar)$ الذي يولّد انتقالاً في الزمن بمقدار t ، والتحويل $\exp(iP_x a/\hbar)$ الذي يولّد انتقالاً في الاتجاه x بمقدار a (حيث P_x هي المركبة x من الزخم الاجمالي للنظام)، والتحويل $\exp[(i\phi/\hbar)J_z]$ الذي يولّد دوران النظام حول المحور Z بزاوية قدرها

ϕ . وإذا كان مؤثر هاملتون لا يتغير بنتيجة دوران كهذا ، فإن :

$$\delta H = 0 = \frac{i\phi}{\hbar}[J_z, H] \qquad (13-89)$$

أي أن H و J_z (المركبة Z من الزخم الزاوي الاجمالي) يتبادلان . وهذا مثال على التصريح الذي ورد سابقاً حول أن خواص التناظر في النظام قد تمكننا في بعض الأحيان من تقرير مسألة المبادلة بين المؤثرات على قاعدة الخواص الهندسية البسيطة .

13--7 خلاصـة .

بيّنا في هذا الفصل كيف أن المصفوفات الواحدية تحول المصفوفات من قاعدة تمثيل ما إلى قاعدة تمثيل آخر ، كما بيّنا عدم تغير المعادلات بين المصفوفات بعد تحويلات كهذه . ولقد وجدنا أن المصفوفات الهرميتية تبقى هرميتية بعد التحويل الواحدي . وقد بيّنا التماثل الوثيق بين الدوران في الفراغ ثلاثي الأبعاد والدوران الواحدي في الفراغ الهيلبرتي . ثم تمت دراسة الحلول لمعادلات القيمة المميزة وذلك من خلال إحالة المصفوفات إلى مصفوفات قطرية . وذكرت بإيجاز الخواص الزمرية للتحويلات الواحدية . ولقد تم تقديم هذه الأفكار فيما يخص المصفوفات المتقطعة ، ومن ثم نوقش توسيعها لتشمل المصفوفات المتصلة اللانهائية .

وأخيراً ، نوقشت التحويلات القانونية ، وبخاصة التحويلات القانونية اللامتناهية في الصغر ، وضمن علاقتها بالتحويلات القانونية الكلاسيكية اللامتناهية في الصغر ، كما جرت دراسة لعملية تكرار عدة من تحويلات لامتناهية في الصغر . وقد بيّنا أن الخواص الهندسية البسيطة للنظام الفيزيائي يمكنها ، أحياناً ، أن تستخدم التقرير المسألة المتعلقة بالمبادلة بين المؤثرات .

مسائل

13--1 لتكن لدينا المصفوفة :

$$R = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

أ) ماهي القيم المميزة والمتجهات ـ الأعمدة المميزة لـ R ؟ ب) من خلال تقدير المصفوفة $R_d = T^{-1}RT$ بيّن وعلى نحو واضح أن التحويل التماثلي الناتج عن المصفوفة T ، والتي تتكون أعمدتها من المتجهات المميزة المستنظمة لـ R ، سوف تجعل R قطرية . ج) بيّن أن القيم المميزة للمصفوفة $R_d = T^{-1}RT$ هي القيم المميزة نفسها للمصفوفة R .

13—2 أ) كوّن المصفوفة T التي تتضمن بمثابة أعمدة المتجهات المميزة المستنظمة للمصفوفة S_z (انظر المعادلة (12—32)). أنجز ذلك بطريقة تضمن أن تكون العناصر القطرية حقيقية موجبة . ب) بيّن أن T هي مصفوفة واحدية وأنها تحول S_x إلى شكلها القطري . جـ) بيّن أنه يمكن تشكيل T بوصفها أحد مؤثري الدوران :

$$T = \exp\left(\pm \frac{i\pi}{2\hbar} S_y\right)$$

هـ) من وجهة نظر الدوران في الفراغ الفعلي ثلاثي الأبعاد ماهو مدلول هذا التحويل ؟ د) إذا نظرنا إليه بوصفه دوراناً في فراغ دالّي عقدي ثنائي الأبعاد ، ماهو مدلوله ؟

13—3 بيّن أنه في التمثيل الزخمي يمكن كتابة الدالات المميزة للطاقة للمتذبذب التوافقي أحادي البعد على الشكل :

$$\Psi_n(p) = u_n\left(\frac{1}{\sqrt{km}}\, p\right)$$

حيث $u_{n(x)}$ الدالات المميزة للطاقة في التمثيل الموضعي .

13—4 يمكن كتابة مؤثر هاملتون الموافق لطاقة البرم ، وبالنسبة للالكترون الذي يبادر برمه حول المجال المغنطيسي الناجم عن عزمه المغنطيسي ، على النحو الآتي :

$$H = -\omega S_z$$

حيث : $\omega = e\mathcal{B}/mc$ تردد المبادرة .

استخدم المؤثر الواحدي $T = \exp(iHt/\hbar)$ لتحويل المؤثرين S_xوS_y إلى تمثيل هايزنبرغ ، وبيّن أن المؤثرين الجديدين يلبيان معادلتي الحركة .

$$\dot{S}_x^\dagger = \omega S_y^\dagger, \qquad \dot{S}_y^\dagger = -\omega S_x^\dagger$$

حيث : $S_x^\dagger = TS_xT^*$ ، وإلخ . لاحظ أن هاتين المعادلتين هما بالذات ما يجب عدّه المعادلتين الكلاسيكيتين للحركة التي يقوم بها دوّام زخمه الزاوي $\hbar/2$ وعزمه المغنطيسي $e\hbar/2mc$ في مجال مغنطيسي شدته $\mathcal{B}$.

13-5 أ) بينّ أن تحويل مؤثرات البرم بنتيجة مؤثر التحويل الواحدي T (المسألة 13-4) يمكن عدّه تحويلاً قانونياً ، وبالتحديد ، دوراناً في الفراغ المكاني حول المحور Z بزاوية قدرها $\theta = -\omega t$.

وإن $S_x^\dagger$ و $S_y^\dagger$ ، وعندما يمنحان هذا التفسير ، هما مركبتا زخم البرم الزاوي باتجاه محوري الاحداثيات الجديدة ، اللذين يدوران بثبات ، ومؤثرات البرم فقط هي التي تتعرض للتحويل الواحدي ، وذلك خلافاً للدالة الموجية .

ب) بينّ أن T^* يستدعي دوراناً حول المحور Z في الاتجاه المعاكس . جـ) بينّ أن المؤثر $S^{\dagger\dagger}$ ، والذي يتم اشتقاقه من Sبوساطة تحويل قانوني ناجم عن T^* ، يملك قيماً متوقعة لمركباته الثلاث مستقلة زمنياً . هـ) اشرح هذه النتيجة .

13-6 ذرة وحيدة الالكترون تتعرض لعمليات قياس قابلة للجمع بينها مسطرة عن النتائج $\ell=3$, $j = 7/2$ و أ) ماهي احتمالية أن القياس التالي لـ S_x سيعطي النتيجة ½؟ ب) إذا أسفرت جملة لاحقة من القياسات عن النتائج $\ell=1$ و$m\ell=0$ و$m_s=½$ ؛ ماهي احتمالية أن يعطي القياس اللاحق النتيجة $j = 3/2$ ؟

13-7 يحوّل المؤثر الواحدي $\exp(-iHt/\hbar)$. مؤثري الموضع والزخم xوP_x إلى المؤثرين (تمثيل هايزنبرغ)

$$X^\dagger = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) x \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right),$$

$$P_x^\dagger = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) P_x \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

أ) بينّ أن هذين المؤثرين وبعد التحويل يلبيان معادلات الحركه الكلاسيكية .

ب) بيّن أنه لأجل المتذبذب التوافقي البسيط ، وفي حالة كون x وP_x في صيغتهما العادية كمؤثرين تفاضليين سيتخذ المؤثران الجديدان الشكل التالي :

$$X^{\dagger} = x \cos \omega t - \frac{1}{\sqrt{km}} i\hbar \sin \omega t \frac{\partial}{\partial x},$$

$$P_x^{\dagger} = -i\hbar \cos \omega t \frac{\partial}{\partial x} - \sqrt{km}\, x \sin \omega t$$

13—8 إن التحويل القانوني الناجم عن المؤثر الواحدي $\exp(iHt/\hbar)$ ، والذي يعدّ تحويلاً قانونياً ، يحول كلاً من x وP_x إلى :

$$X^{\dagger\dagger} = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) x \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

$$P_x^{\dagger\dagger} = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) P_x \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

أ) بيّن أنه بالرغم من كون هذين المؤثرين دالتين تابعتين للزمن بوضوح ، فإنهما يمثلان ملحوظين ، كل منهما ثابت حركة (توجيه : انتقل إلى تمثيل هايزنبرغ واستخدم المعادلة (11—46). ب) بيّن أنه يتوجب عدّ هذين المؤثرين يمثلان الكميتين المعنيتين ولكن في لحظة $t = 0$.

13—9 يمكن عدّ مؤثر زخم البرم الزاوي مولداً لدوران لامتناه في الصغر من قبل متجهات زخم البرم الزاوي في الفراغ . وبالتالي ، فإن التحويل القانوني الذي تولده المصفوفة الواحدية $V = \exp(i\theta S_z/\hbar)$ ، يجب أن يحدث دوراناً في نظام إحداثيات البرم بزاوية قدرها θ حول المحور Z .

أ) بيّن ولأجل حالة البرم $\frac{1}{2}$ ، حيث $S = \frac{1}{2}\hbar\sigma$ ، أن :

$$V = \begin{bmatrix} \exp\left(\frac{i\theta}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{i\theta}{2}\right) \end{bmatrix}$$

ب) قدر الكمية $V^{-1}\sigma V$. جـ) بيّن أنه يمكن تفسير هذه الكمية على

أنها σ' في نظام الاحداثيات بعد دورانه . د) في حالة الدوران بزاوية °90 بيّن أن V تحوّل المتجه المميز لـ σ_x إلى المتجه المميز لـ σ_y ، وهكذا . هـ) بين بوساطة علاقات المبادلة ، ودون استخدام الشكل الصريح لـ $\boldsymbol{\sigma}$ ، أن التحويل الناجم عن المصفوفة الواحدية $W = \exp(i\theta \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2)$ ، حيث **n** متجه أحادي ثابت يولد دوراناً بزاوية قدرها θ حول المحور **n** ، وذلك عند تطبيقه على

13—10 ثمة الكترون يوجد في الحالة المميّزة بالأعداد الكمية j و ℓ و m_j . ويتم قياس المركبة Z من زخم برمه الزاوي . احسب احتمالية الحصول على النتيجة $+\hbar/2$

13—11 بيّن أن معادلة كثير الحدود المميز (13—31) تتحقق إذا ما استبدلت q بالمصفوفة Q (مبرهنة كايلي ـ هاملتون) . (**توجيه** : اجعل المصفوفة الناتجة عن المعادلة تؤثر في متجه ـ عمود اختياري بعد نشره بوساطة دالات قاعدية مناسبة) .

الفصل الرابع عشر

الطرائق التقريبية

14–1 الحاجة إلى الطرائق التقريبية .

كنا سابقاً وأثناء عرضنا لميكانيك الكم ، نعالج فقط المواقف الفيزيائية البسيطة جداً ، والتي يمكن لأجلها الحصول على حلول دقيقة لمعادلة شرودينغر . ولكن ، هذا الوضع المؤاتي قد ساد فقط بسبب البساطة النسبية لمؤثر هاملتون الذي يتم النظر فيه . أما بالنسبة للسواد الأعظم من النظم ذات الأهمية الفيزيائية ، فإن الحل الدقيق لمعادلة شرودينغر ينطوي على صعوبات فيزيائية جمة .

وعلى الرغم من التعقيد الذي يصادف عادةً ، فإن تحصيل الكثير من المعارف القيّمة حول سلوك النظام قيد الاهتمام غالباً ما يكون ممكناً . وهناك طريقتان اثنتان تسمحان بانجاز ذلك . وتكمن إحدى الطريقتين في البحث عن معلومات حول النظام تكون أقل من تلك المعلومات التي تقدمها الدالة الموجية . فمثلاً ، يمكن أن تبرز الحاجة إلى معرفة طاقة النظام دون ضرورة الاحاطة بتفاصيل إضافية تتعلق بالدالة الموجية .

وتكمن الطريقة الثانية ، والتي تسمح بالحصول على معلومات حول النظم المعقدة في مقارنة الأخيرة مع نظام يشبهها ، ولكنه أبسط منه . وهكذا ، وليكن مؤثر هاملتون مؤلّفاً من جزءين : جزء بسيط يجيز حلاً لمعادلة شرودينغر فيما لو أخذ بمفرده ، وجزء ثان يتكون من حد إضافي واحد (أو أكثر) صغير نسبياً فعندئذ ، يمكن الحصول على السلوك التقريبي للنظام بدراسة الجزء البسيط الذي يجيز الحل المذكور كون هذا الجزء يحدد السلوك الأساسي ، ومن ثم بمعالجة السلوك الفعلي ، وكأنه تغيّر (أو اضطراب) ثانوي نسبياً عن السلوك الأساسي الذي أمكن حسابه . ويمكن تقدير الاضطراب الثانوي من خلال دراسة الحدود الصغيرة المعقدة التي تمّ تجاهلها في البداية .

سوف يتم في هذا الفصل شرح وعرض التقنيات القائمة على كل من هاتين الطريقتين في المقاربة ، مما سوف يوسع ـ وبدرجة بالغة ـ نطاق المسائل التي يمكن

معالجتها في ميكانيك الكم بالقدر نفسه من الثقة .

14–2 نظرية الاضطراب المستقل زمنياً .

إن أول طريقة تقريبية سندرسها تعرف باسم **نظرية الاضطراب** ، وهي مثال على طريقة المقاربة الثانية التي أشرنا إليها أعلاه . ولنأخذ الحالة التي يمكن فيها كتابة مؤثر هاملتون بالشكل التالي :

$$H = H_0 + H_1 \qquad (14-1)$$

حيث : H_0 الجزء الأعظم بالمقارنة مع H_1 ، أي أن الطاقة المرتبطة بـ H_0 كبيرة ، وذلك بالمقارنة مع تلك المرتبطة بـ H_1 .

نعتمد هنا افتراضين إضافيين أولهما أن H لا يتبع للزمن بشكل صريح وثانيهما أن H_0 يؤدي إلى معادلة لقيمة المميزة للطاقة تقبل الحل :

$$H_0 u_k = E_k u_k \qquad (14-2)$$

وتكون الدالات u_k هنا دالات مميزة (معلومة) توافق القيم المميزة E_k لمؤثر هاملتون H_0 (المعلومة أيضاً) .

وإنه لمن الممكن دائماً كتابة المعادلة $(14-1)$ بمثابة حالة خاصة للمؤثر :

$$H = H_0 + \lambda H_1 \qquad (14-3)$$

حيث λ هي معلم اختياري يمكن فيما بعد أخذه مساوياً الواحد وذلك بقصد الحصول على الحل المرغوب فيه لمسألة القيمة المميزة لمؤثر هاملتون $(14-1)$. ويفترض أنه يجوز نشر الدالات المميزة والطاقات المميزة لمؤثر هاملتون الكامل H من المعادلة $(14-3)$ على شكل سلسلة قوى بالنسبة لـ λ :

$$\psi = \psi_0 + \lambda\psi_1 + \lambda^2\psi_2 + \lambda^3\psi_3 + \cdots , \qquad (14-4)$$

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \lambda^3 E_3 + \cdots$$

وعند المرور إلى النهاية $\lambda \to 0$ ، تؤول معادلة القيمة المميزة للطاقة إلى :

$$H_0\psi_0 = E_0\psi_0 \qquad (14-5)$$

وتبين المعادلة (14−2) ضرورة إجراء المطابقات :

$$\psi_0 \equiv u_k \tag{14-6}$$

و :

$$E_0 \equiv E_k \tag{14-7}$$

حيث : u_k إحدى الدالات المميزة للنظام غير المضطرب و E_k الطاقة المميزة الموافقة لها .

وبكتابة معادلة القيمة المميزة للطاقة ، مستفيدين من (14−3)و(14−4)، نحصل على :

$$\begin{aligned}(H_0 + \lambda H_1)(\psi_0 + \lambda\psi_1 + \lambda^2\psi_2 + \cdots) \\ = (E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \cdots)(\psi_0 + \lambda\psi_1 + \lambda^2\psi_2 + \cdots),\end{aligned} \tag{14-8}$$

$$\begin{aligned}H_0\psi_0 + \lambda(H_1\psi_0 + H_0\psi_1) + \lambda^2(H_0\psi_2 + H_1\psi_1) + \cdots \\ = E_0\psi_0 + \lambda(E_1\psi_0 + E_0\psi_1) + \lambda^2(E_2\psi_0 + E_1\psi_1 + E_0\psi_2) + \cdots\end{aligned}$$

وبما أن λ معلم اختياري ، فإن باستطاعة المرء أن يساوي بين المعاملات التي تقف أمام قوى λ المتشابهة على طرفي المعادلة :

$$\begin{aligned}H_0\psi_0 &= E_0\psi_0, \\ H_1\psi_0 + H_0\psi_1 &= E_1\psi_0 + E_0\psi_1, \\ H_0\psi_2 + H_1\psi_1 &= E_2\psi_0 + E_1\psi_1 + E_0\psi_2\end{aligned} \tag{14-9}$$

ولقد نوقشت المعادلة الأولى في السابق . وإذا نشرنا ψ_1 بلغة الدالات المميزة u_k غير المضطربة :

$$\psi_1 = \sum_n c_n u_n \tag{14-10}$$

واستخدمنا المعادلتين (14−6) و(14−7)، فسنحصل من المعادلة الثانية في (14−9) على :

$$H_1 u_k + H_0 \sum_n c_n u_n = E_1 u_k + E_k \sum_n c_n u_n,$$
$$H_1 u_k + \sum_n c_n E_n u_n = E_1 u_k + \sum_n c_n E_k u_n \qquad (14-11)$$

وإذا ضربنا هنا بـ $\bar{u}_j$ من اليسار وأجرينا المكاملة على كل الفراغ نصل إلى :

$$(u_j, H_1 u_k) + \sum_n c_n E_n (u_j, u_n) = E_1 (u_j, u_k) + \sum_n c_n E_k (u_j, u_n),$$
$$(u_j, H_1 u_k) + c_j E_j = E_1 \delta_{jk} + c_j E_k \qquad (14-12)$$

وفي حالة $j = k$ ، فإن ذلك يؤول إلى :

$$E_1 = (u_k, H_1 u_k) = (H_1)_{kk} \qquad (14-13)$$

وهكذا ، فإن المرتبة الأولى من اضطراب طاقة الحالة الموافق للحالة الطاقية غير المضطربة ذات الطاقة E_k تعطى من خلال العنصر المصفوفي $(H_1)_{kk}$. وفي حالة $j \neq k$ تسفر المعادلة (14—12) عن تعبير لأجل المعاملات C_j ، وبالتالي ، لأجل المرتبة الأولى من الاضطراب ψ_1 للدالة المميزة الموافقة u_k :

$$c_j = \frac{(H_1)_{jk}}{E_k - E_j} \qquad (14-14)$$

لا تتحدد قيمة C_k بوساطة هذه العملية ، ولذلك ، يفترض كون الدالة الموجية مستنظمة :

$$\begin{aligned} 1 &= (\psi, \psi) \\ &= (\psi_0 + \lambda\psi_1 + \cdots, \psi_0 + \lambda\psi_1 + \cdots) \\ &= (\psi_0, \psi_0) + \lambda[(\psi_1, \psi_0) + (\psi_0, \psi_1)] \\ &\qquad + \lambda^2[(\psi_0, \psi_2) + (\psi_1, \psi_1) + (\psi_2, \psi_0)] + \cdots \\ &= 1 + \lambda[(\psi_1, \psi_0) + (\psi_0, \psi_1)] + \lambda^2[(\psi_0, \psi_2) + (\psi_1, \psi_1) + (\psi_2, \psi_0)] + \cdots \end{aligned} \qquad (14-15)$$

وبما أن λ اختيارية ولا تساوي الصفر ، يجب أن يتلاشى ، وعلى حدة ، كل من الحدود المتضمنة بين قوسين وبخاصة :

$$(\psi_1, \psi_0) + (\psi_0, \psi_1) = 0 \qquad (14-16)$$

وانطلاقاً من المعادلة (14−10)، يمكن كتابة ذلك كالآتي :

$$\left(\sum_n c_n u_n, u_k\right) + \left(u_k, \sum_n c_n u_n\right) = 0, \qquad (14-17)$$

$$\overline{c_k} + c_k = 0$$

وهكذا ، يجب أن يتلاشى الجزء الحقيقي من C_k :

$$c_k = i\gamma \qquad (14-18)$$

عندئذ يمكن وفي المرتبة الأولى كتابة الدالة الموجية على الشكل التالي :

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_0 + \lambda\psi_1 \\ &= u_k + i\gamma\lambda u_k + \lambda \sum_{n\neq k} \frac{(H_1)_{nk}}{E_k - E_n} u_n \\ &= (1 + i\gamma\lambda)u_k + \lambda \sum_{n\neq k} \frac{(H_1)_{nk}}{E_k - E_n} u_n \end{aligned} \qquad (14-19)$$

وبما أن استنظام λ يهمنا حالياً فقط بالنسبة للدرجة الأولى من λ ، يمكن استبدال $1 + i\gamma\lambda$ على الشكل التالي :

$$1 + i\gamma\lambda \approx \exp(i\gamma\lambda) \qquad (14-20)$$

من هنا نرى أن المعامل C_k في المعادلة (14−10) له تأثير في تغير الطور في الدالة الموجية u_k (الأصلية غير المضطربة)، وذلك بالمقارنة مع طور الحدود الاضطرابية . وبغية الحفاظ على تعامد الدالات الموجية المضطربة ، يجب أن يؤخذ هذا الطور مساوياً الصفر :

$$C_k = 0 \qquad (14-21)$$

لقد استخلصنا تأثير الحد H_1 من اضطراب مؤثر هاملتون على الدالة الموجية والطاقة المميزة في مرتبته الأولى . ويمكننا الحصول على حدود المرتبة الثانية بأسلوب مشابه مستفيدين من حلول المرتبة الأولى والحدود المتضمنة للمرتبة λ^2 في سلسلة القوى . وإن نتائج مثل هذه المعالجة هي فقط التي سوف تورد هنا . تكون الدالة الموجية في المرتبة الثانية كالآتي :

$$\psi = u_k + \sum_{n\neq k} \frac{(H_1)_{nk}}{E_k - E_n} u_n \qquad (14-22)$$

$$+\sum_{n\neq k}\left\{\left[\sum_{m\neq k} \frac{(H_1)_{nm}(H_1)_{mk}}{(E_k - E_n)(E_k - E_m)} - \frac{(H_1)_{nk}(H_1)_{kk}}{(E_k - E_n)^2}\right]u_n - \frac{1}{2}\frac{|(H_1)_{nk}|^2}{(E_k - E_n)^2}u_k\right\}$$

وتكون الطاقة :

$$E = E_k + (H_1)_{kk} + \sum_{n\neq k} \frac{|(H_1)_{nk}|^2}{E_k - E_n} \qquad (14-23)$$

ولنأخذ ، وبمثابة مثال على نظرية الاضطراب ، المتذبذب التوافقي أحادي البعد والذي يملك مؤثر هاملتون :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \tfrac{1}{2}kx^2 + ax^4 \qquad (14-24)$$

ويتكون مؤثر هاملتون غير المضطرب هنا من الحدين الأولين بينما يعطى الاضطراب والذي يفترض كونه صغيراً ، بالحد الأخير :

$$H_1 = ax^4 \qquad (14-25)$$

أما بالنسبة للحالة الدنيا ، والتي تعطي دالتها الموجية ψ_0 بالمعادلة (4—60) فيكون تدقيق المرتبة الأولى بالنسبة للطاقة هو :

$$\begin{aligned} E_1 &= (\psi_0, H_1\psi_0) \\ &= \left(\frac{k}{\pi\hbar\omega}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{kx^2}{2\hbar\omega}\right)ax^4\exp\left(-\frac{kx^2}{2\hbar\omega}\right)dx = \\ &= \left(\frac{k}{\pi\hbar\omega}\right)^{1/2} a\int_{-\infty}^{\infty} x^4\exp\left(-\frac{kx^2}{\hbar\omega}\right)dx \qquad (14-26) \\ &= \frac{3a}{4}\left(\frac{\hbar\omega}{k}\right)^2 \end{aligned}$$

لذلك ، فإن طاقة الحالة الدنيا للمتذبذب غير التوافقي هي تقريباً :

$$E \approx \frac{\hbar\omega}{2}\left[1 + \frac{3a}{2}\left(\frac{\hbar\omega}{k^2}\right)\right] \qquad (14-27)$$

لقد افترض هذا العرض أن الحالة الطاقية قيد الدراسة هي حالة غير مفككة .

وبالمقابل ، إذا كانت الحالة الطاقية مفككة ، فإن المعالجة يجب أن تتغير . وتنشأ هذه الصعوبة لأن الطاقة في مخرج المعادلة (14—14) تصبح صفراً عندما تكون الحالة الطاقية k قيد البحث (والتي طاقتها غير المضطربة تساوي E_k) مفككة مع الحالة j ، عندما تكون عناصر المصفوفة $(H_1)_{jk}$ تزاوج بين الحالتين أيضاً . ويمكن التغلب على هذه الصعوبة عندما تتلاشى عناصر المصفوفة الموافقة للجزء المضطرب من مؤثر هاملتون بين كل أزواج الحالات الطاقية المفككة . وهذا يعني أنه يجب على مصفوفة هاملتون :

$$H_{jk} = (H_0)_{jk} + (H_1)_{jk} \qquad (14-28)$$

أن تكون قطرية ، بما في ذلك كل مصفوفة جزئية مرتبطة بمجموعة جزئية مرتبطة بمجموعة من الحالات الطاقية المفككة قيد البحث . وهكذا ، فإن الصعوبة في تطبيق نظرية الاضطراب على الحالات الطاقية المفككة ، تزول بتحويل المصفوفات الجزئية المعنية في مصفوفة هاملتون الاجمالية إلى شكلها القطري الصارم .

يمكن إنجاز هذا العمل دائماً ، وهو يؤدي إلى إيجاد التراكيب الخطية والملائمة v_j كدالات متعامدة مستنظمة موافقة للحالات الطاقية المفككة u_k ، بحيث أن عناصر المصفوفة H_1 غير القطرية تساوي الصفر بين الحالات v_j :

$$(v_i, H_1 v_j) = 0, \qquad i \neq j, \qquad (14-29)$$

حيث :

$$v_j = \sum_{k=1}^{m} a_{jk}^{(s)} u_k \qquad (14-30)$$

تمثل u_k هنا الجملة الأصلية من الدالات الموجية للطاقة المفككة E_s ، وقد افترضنا أن درجة التفكك تساوي m ضعفاً .

أما بالنسبة للتعميم السابق ، والذي كان الحد المضطرب فيه هو λH_1 ، فمن الواضح أنه كلما اقتربت λ من الصفر ، يتوجب على الدالة الموجية أن تقترب من الدالات الموجية الخاصة بمؤثر هاملتون غير المضطرب H_0 . بيد أنه ، وفي حالة التفكك ، لن تكون الدالة المعنية ـ وبشكل عام ـ واحدة من الدالات u_k الأصلية في (14—2)، بل ستكون ـ وعوضاً عن ذلك ـ تركيباً خطياً لها ، وذلك كما هو الحال في

المعادلة (14—30) . إن نقل المصفوفة إلى الحالة القطرية المشار إليه أعلاه يؤكد فقط أن الدالات الموجية المضطربة تقارب الدالات المعنية v_i ، وذلك عندما $\lambda \to 0$

هناك مثال على المسألة التي يثيرها التفكك وعلى حلها ، ويكمن هذا المثال في حالة الإيوان ذي المغنطيسية المسايرة ، والذي يشغل موضعاً ملائماً في الهيكل الشبكي . ويكون مؤثر هاملتون لأجل إيون كهذا بالغ التعقيد في العادة . فهو يتضمن حدوداً توافق كلاً من الطاقات الحركية للالكترونات والمفاعلات الكولومية بين هذه الالكترونات وفيما بين الأخيرة من جهة ونواة الإيمان من جهة أخرى والمفاعلات بين الالكترونات الإيو نية ومجالات البلورة التي تنشأ عن الذرات المجاورة والمفاعلات البرمية ـ المدارية ، وربما كثير غيرها ، مثل طاقات زيمان والمفاعلات مفرطة الدقة وكذلك مفاعلات رباعيات الأقطاب ، إلخ . وبغض النظر عن ذلك ، يمكن تطبيق نظرية الاضطراب تطبيقاً ناجحاً على نظام كهذا لأجل الكثير من المسائل ذات الأهمية . وسوف ندرس مسألة نتوقع أنها بسيطة ، وهي مسألة المجموعة الدنيا من الحالات الالكترونية المرافقة لإيون يساوي برمه الفعال $S = 1$ ، ويكون متموضعاً في نقطة من الهيكل الشبكي ، حيث يكون الكمون الفعال الذي يؤثر في الإيون معيني التناظر . وتكون المستويات الطاقية الدنيا قابلة للتوصيف بلغة ما يسمى **مؤثر هاملتون البرمي**(*) ، والذي ترتبط معالمه مباشرةً بخواص البلورة الإيونية . ونستطيع في غياب المجال المغنطيسي المطبق خارجياً كتابة مؤثر هاملتون البرمي بالشكل التالي :

$$H = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2) \qquad (14-31)$$

وينشأ الحد DS_z^2 عندما يتشوّه التناظر ثماني الأوجه (المهيمن)، والذي يوجد فيه الإيون ذو المغنطيسية المسايرة ، ليتحول في أحوال كثيرة إلى تناظر رباعي (أو ثلاثي) الأوجه . هذا ، بينما يؤدي التشوه اللاحق نحو التناظر المعيني (الأدنى) إلى نشوء الحد الثاني $E(S_x^2 - S_y^2)$ وينطبق مؤثر هاملتون البرمي (14—31)

---

* انظر :

(*) B. Bleaney and K. W. H. Stevens, "Paramagnetic Resonance," *Rpts. Progr. Phys.* 16, 108 (1953). K. D. Bowers and J. Owen, "Paramagnetic Resonance II," *Rpts. Progr. Phys.* **18,** 304 (1955).

على الكثير من البلورات التي بينها ملح النيكل $K_2Ni(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$

سوف ننظر في المعالجة التالية إلى الحد المعيني $E(S_x^2 - S_y^2)$ بمثابة اضطراب يطرأ على النظام . وهذا أمر معقول ، ذلك لأن E تكون عادةً أصغر من D بقدر بالغ ، ولأن الطاقات الموافقة لكلا الحدين صغيرة بالمقارنة مع كلاً من الطاقة الحركية والحدود الكولومية من الطاقة . وتكون الدالات المميزة الملائمة للحد $D\,S_z^2$ هي الدالات المميزة لـ S_z ، مما يعني ، بترميز المصفوفات ، أن :

$$\psi_1 = \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}, \quad \psi_3 = \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix} \qquad (14-32)$$

وتكون الطاقات الموافقة (غير المضطربة) هي :

$$E_1^0 = \frac{D\hbar^2}{4}, \quad E_2^0 = 0, \quad E_3^0 = \frac{D\hbar^2}{4} \qquad (14-33)$$

ومن الواضح للعيان أن E_1° وE_3° غير مفككتين . وإذا تم حساب التدقيقات ذات المرتبة الأولى لأجل الطاقة المتعلقة بالحد $E(S_x^2 - S_y^2)$ ، يتبين أنها جميعاً تساوي الصفر ، لذلك فإن :

$$\begin{aligned} E(S_x^2 - S_y^2)\psi_1 &= \hbar^2 E\psi_3, \\ E(S_x^2 - S_y^2)\psi_2 &= 0, \\ E(S_x^2 - S_y^2)\psi_3 &= \hbar^2 E\psi_1 \end{aligned} \qquad (14-34)$$

وعليه فإن :

$$\begin{aligned} (1|E(S_x^2 - S_y^2)|1) &= \hbar^2 E(1|3) = 0, \\ (2|E(S_x^2 - S_y^2)|2) &= 0, \\ (3|E(S_x^2 - S_y^2)|3) &= \hbar^2 E(3|1) = 0 \end{aligned} \qquad (14-35)$$

تتفق هذه النتيجة مع نتيجة المعادلة (35—9)، والتي بيّنت في حينه أن القيمتين المتوسطتين لمربّعي المركبتين x وy من الزخم الزاوي متساويتان ، وذلك

عندما تكون المركبة Z معلومة . واستخدمنا في المعادلة (35—14) ترميزاً ملائماً لعناصر المصفوفات ، وهو ترميز أدخله ديراك : الدليلان الأول والثاني مكتوبان قبل مؤثر هاملتون وبعده بالترتيب هذا ما يوفر حجرة فسيحة لكتابة الدلائل المضاعفة حينما تصبح ضرورية . وإن الحصول على المعادلات (34—14) ممكن بسهولة على أساس المعادلات (32—14) وباستخدام تمثيل الاضطراب على شكل مصفوفة :

$$E(S_x^2 - S_y^2) = \hbar^2 E \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (14-36)$$

نستطيع من المعادلات (33—14) و(35—14) أن نرى كيف أن المرتبة الثانية من طاقة الاضطراب يتعذّر الحصول عليها من خلال التطبيق المباشر للمعادلة (23—14) ذلك لأن الحالتين غير المضطربتين ψ_1 و ψ_3 مفككتان . لذلك يتوجب علينا أن نأخذ تراكيب خطية لهذه الحالات بمثابة دالات غير مضطربة ، بحيث أن مصفوفة الاضطراب لا تملك عناصر تصالبية بين الدالات الجديدة للحالة . ولتكن الدالتان :

$$\psi_\pm \equiv \begin{bmatrix} a_\pm \\ 0 \\ b_\pm \end{bmatrix} \qquad (14-37)$$

هما التركيبان لـ ψ_1 و ψ_3 المطلوبان . فبقصد تفادي الحدود التصالبية ، يكفي جعل المصفوفة الجزئية الموافقة لاضطراب هاتين الحالتين قطرية :

$$E(S_x^2 - S_y^2)\psi_\pm = \gamma_\pm \psi_\pm, \qquad (14-38)$$

أو :

$$\hbar^2 E \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_\pm \\ 0 \\ b_\pm \end{bmatrix} = \gamma_\pm \begin{bmatrix} a_\pm \\ 0 \\ b_\pm \end{bmatrix} \qquad (14-39)$$

ويعطينا حل هاتين المعادلتين بمثابة دالتين موجيتين مستنظمتين :

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \pm 1 \end{bmatrix} \qquad (14-40)$$

ومن السهولة بمكان رؤية أن هاتين الحالتين معامدتان لـ ψ_2 . ويسهل مع الحصول على العلاقات التالية :

$$E(S_x^2 - S_y^2)\psi_+ = \hbar^2 E\psi_+,$$
$$E(S_x^2 - S_y^2)\psi_- = -\hbar^2 E\psi_- \qquad (14-41)$$

لذلك ، فإن :

$$(+|E(S_x^2 - S_y^2)|+) = \hbar^2 E,$$
$$(-|E(S_x^2 - S_y^2)|-) = -\hbar^2 E, \qquad (14-42)$$
$$(+|E(S_x^2 - S_y^2)|-) = (-|E(S_x^2 - S_y^2)|+) = 0$$

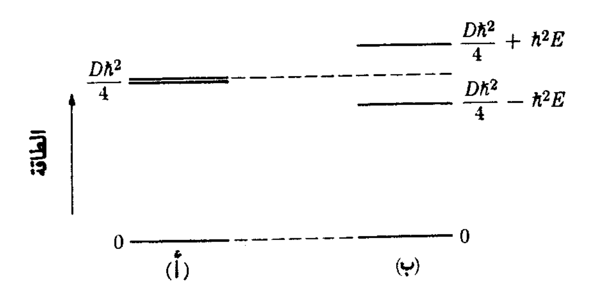
وهكذا ، تتلاشى الآن المرتبة الثانية من طاقة الاضطرابات وتعطي طاقات الحالات الثلاث بالعلاقات التالية :

$$E_+ = \frac{D\hbar^2}{4} + \hbar^2 E,$$
$$E_2 = 0, \qquad (14-43)$$
$$E_- = \frac{D\hbar^2}{4} - \hbar^2 E$$

(انظر الشكل (14-1)).

يجب أن نلاحظ أن تحويل المصفوفة الجزئية إلى شكلها القطري وبالنسبة للفضاء الجزئي (1,3)، يؤدي في هذه الحالة البسيطة إلى جعل مؤثر هاملتون الاجمالي (14-31) قطرياً ، وبذلك يحل مسألة القيمة المميزة للطاقة حلاً دقيقاً ، فضلاً عن مجرد تحديد المرتبة الثانية من الحد الاضطرابي .

سنأخذ كاستعراض نهائي نظرية الاضطراب حداً يوجد في مؤثر هاملتون الخاص بالذرة المعزولة ، هو حد **المفاعلة البرمية ـ المدارية** . وهذا طراز آخر من المفاعلة بين العزم المغنطيسي للالكترون ومحيطه . وبغية تبسيط النقاش ، سندرس تأثير هذا الحد في المستويات الطاقية لذرات المعادن القلوية (والهيدروجين)، والتي ترافق تهيّج الالكترون الأقصى (الكترون التكافؤ). تشارك الالكترونات الداخلية (الكترونات اللب) بشكل طفيف فقط وبطريقة حركية في حركة الكترون التكافؤ ، وتأثيرها سوف يوضع في الحسبان على نحو يمكن التعبير عنه ضمن الجهد الشعاعي



الشكل $14-1$: مخطط المستويات الطاقية لإيون ، برمه الفعال $S = 1$ ، داخل الشبكية البلورية ، في مجال مغنطيسي مساوٍ للصفر . أ) المستويات الطاقية الناجمة عن التناظر رباعي الأوجه لدى النظام . ب) التشعب اللاحق لأزواج الحالات المفككة بسبب التشوه الإضافي الصغير ، ذي التناظر المعيني .

الفعال ، والذي يمكن كتابته مجتمعاً مع الكمون النووي الكولومي على شكل $V_{(r)}$.

بهدف معالجة هذه المسألة ، يجب أن نتذكر أنه بالرغم من كون المرء يرى - في إطار المرجعية ، حيث الذرة ساكنة - فقط المجال الكهربائي لذي تنتجه النواة والسحابة الالكترونية المحيطة بها كلبّ ، وبالرغم من ذلك ، نشاهد مجالاً مغنطيسياً في نظام الاحداثيات التي يتحرك مع الكترون التكافؤ كنتيجة للتحول النسبي الذي يجري بين المجالين الكهربائي والمغنطيسي . ومقدار هذا المجال يعطى بالعلاقة :

$$\mathcal{B} = -\frac{v}{c} \times \varepsilon \qquad (14-44)$$

حيث السرعة v هي السرعة التي يتحرك بها الالكترون عبر الذرة والمتجه ε يتعلق بشدة المجال الكهربائي الذي يتحرك ضمنه الالكترون ، و $\vec{\mathcal{B}}$ هو المجال المغنطيسي الناتج الذي يؤثر في الالكترون المتحرك .

يتفاعل المجال المغنطيسي مع العزم المغنطيسي للالكترون مسفراً عن عزم قوى يميل إلى فتل محور البرم ومؤدياً إلى مبادرة برم الالكترون . وبهدف الحصول على طاقة المفاعلة بين برم الالكترون وهذا المجال المغنطيسي الحركي ، نأخذ الجداء السلمي (بإشارة سالبة) لشدة المجال المغنطيسي (كما هي في المعادلة (44-14)) وللعزم المغنطيسي لدى الالكترون (كما هو في المعادلة (36-12)) . ولكنه ، يتوجب علينا الآن ، وإضافةً إلى تحوّل المجال الكهرمغنطيسي ، حسبان التأثير النسبي اللاحق .

ويؤول هذا التأثير الحركي الصرف ، والناجم عن تسارع الالكترون ، إلى عامل جداء في طاقة المفاعلة يساوي $\frac{1}{2}$ ؛ ويسمح هذا العامل المعروف باسم **عامل توماس***لنا بكتابة طاقة المفاعلة بين برم الالكترون والمجال المغنطيسي الحركي وذلك كما يلي :

$$H_{so} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}\cdot\left(\frac{v}{c}\times\mathcal{E}\right) = -\frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{\mu}}{mc}\cdot(\mathcal{E}\times \mathbf{P}) = \frac{1}{2}\frac{1}{mc}\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}(r\times \mathbf{P})\cdot\boldsymbol{\mu}$$

$$= \frac{e}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r^2}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \qquad (14-45)$$

حيث : ϕ تمثل دالة الجهد الكهرساكن (والتي يعطي تدرجها السالب $\vec{\nabla}\phi$ — المجال الكهربائي)، وV هي الطاقة الكامنة الفعالة الاجمالية للالكترون في المجال الكهربائي . ولقد افترضنا هنا أن المجال الكهربائي شعاعي تماماً (وبكلمات أخرى ، أنه طالما يتعلق الأمر بالكترون التكافؤ ، فنحن نتعامل مع مسألة قوة مركزية). ومن الواضح للعيان أن طاقة المفاعلة تتناسب طرداً مع الجداء السلمي للزخم الزاوي المداري للالكترون وزخم برمه الزاوي . وباضافة طاقة المفاعلة هذه إلى مؤثر هاملتون الخاص بالكترون التكافؤ ، يكون لدينا :

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + V(r) + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \qquad (14-46)$$

تتوقف المرتبة الأولى من الاضطراب في المستويات الطاقية على الدالة الموجية الشعاعية وعلى الزخم الزاوي المتعلق بالحالة الطاقية عبر الجداء السلمي L.S . في المعادلة (14—46) يبادل هذه المؤثرات . لذلك ، فإننا نستطيع توصيف حالة الذرة بالأعداد الكمية n وj وℓ وs حيث n هو **العدد الكمي الرئيسي** المرتبط بالجزء الشعاعي من الدالة الموجية (انظر الفصل العاشر). وانطلاقاً من المعادلة (9—71)، يمكن أن نعيد كتابة مؤثر هاملتون على الشكل التالي :

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + V(r) + \frac{1}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(J^2 - L^2 - S^2) \qquad (14-47)$$

وبما أن المؤثر الواقع بين قوسين في الحد الثالث من هذه المعادلة سوف يؤثر (وبالنسبة

* انظر :

* L. H. Thomas, "The Motion of the Spinning Electron," *Nature* **117**, 514 (1926).

لكل واحدة من الحالات الطاقية المستقرة) في الدالة المميزة لكل من المؤثرات بين القوسين ، فإن الحد المتضمن للقوسين يصبح مجرد عدد مؤدياً إلى طاقة كامنة فعالة V تعطى ـ في حالة طاقية محددة ـ بالعلاقة التالية :

$$V'(r) = V(r) + \frac{1}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\hbar^2 \quad (14-48)$$

حيث استخدمنا بوضوح أنه بالنسبة لالكترون التكافؤ يكون $S = 1/2$.

يكون التدقيق البرمي ـ المداري لطاقة الالكترون صغيراً بالمقارنة مع فضلة الطاقة ويمكن كتابتها كالآتي :

$$E_{nlj} = \frac{1}{4m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{nl}[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\hbar^2 \quad (14-49)$$

ويؤثر هذا الأمر في تشعّب المستويات الطاقية المفككة ، والتي تتميز بقيم متساوية من n وℓ، ولكن باتجاهات مختلفة نسبياً لـ S وL ، أي بقيم مختلفة من j . ويتحول بخاصة في كل الحالات الطاقية ، وباستثناء الحالة S (حيث $\ell=0$) ، يتحول كل مستوى طاقي إلى ثنائية (doublet) بما يتفق مع العلاقة $j = \ell + 1/2$. وانطلاقاً من المعادلة (14—49)، يكون مقدار الفصل في الثنائية كالتالي :

$$\Delta E_{\text{doublet}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(2l+1)\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{nl} \quad (14-50)$$

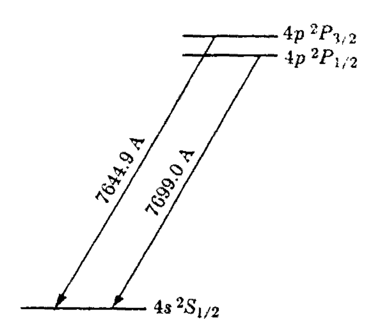
وهكذا ، تختلف الحالة $P_{3/2}$ (حيث $\ell=1$ و$j=1/2$) عن المستوى $P_{1/2}$ من حيث الطاقة بمقدار يساوي :

$$\Delta E_{P_{3/2}-P_{1/2}} = \frac{3\hbar^2}{4m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{nl} \quad (14-51)$$

ينجم الخطان D الشهيران في طيف الصوديوم عن الانتقال من الحالتين الأدنى $P_{3/2}$ و $P_{1/2}$ إلى الحالة الدنيا $S_{1/2}$ ، وذلك بسبب المفاعلة البرمية ـ المدارية التي يتكشف عنها هذان الخطان بشكل منفصل . أما في البوتاسيوم ، فيقع الخطان المعنيان ضمن المنطقة تحت الحمراء القريبة (انظر الشكل (14—2)).

ويجب أن نلاحظ أن حساب طاقة المفاعلة البرمية ـ المدارية يستخدم مرةً نظرية

الاضطراب المفكك ، ذلك لأنه في غياب هذا الحد يتبين أن المستويين $j=\ell\pm½$ ، ولكن اختيار الدالات الموجية كدالات مميزة مشتركة للمؤثرات H وJ^2 وL^2 وS^2 اضطرّ الدالات الأصلية إلى جعل مصفوفة الاضطراب قطرية مما منع التفكك من الظهور للعيان .



الشكل 14 ـ 2 : مخطط جزئي للمستويات الطاقية للبوتاسيوم ، يبين الانتقال الضوئي من الحالتين *P* ، الأدنى ، إلى الحالة الدنيا *S* .

14-3 نظرية الاضطراب التابع زمنياً .

لندرس الآن الحالة التي يمكن فيها مرةً أخرى تقسيم مؤثر هاملتون إلى جزءين H_0 وH_1 كما في المعادلة (14-1)، ولكن الحد الاضطرابي الصغير H_1 تابع للزمن بوضوح . وعندئذ ، تكون معادلة شرودينغر كالتالي :

$$(H_0 + H_1)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (14-52)$$

وتحقق الدالات المميزة للطاقة u_k المستقلة زمنياً ، والموافقة لمؤثر هاملتون غير المضطرب H_0 المستقل زمنياً ، ـ ومن جديد ـ المعادلة التالية :

$$H_0 u_k = E_k u_k \qquad (14-53)$$

وتشكل ـ مرةً أخرى ـ جملة متعامدة ومستنظمة تصلح لنشر أية دالة اختيارية . وبالتالي ، يمكن نشر الدالة الموجية في المعادلة (14-52)على الشكل التالي :

$$\psi = \sum_k c_k(t) \exp(-i\omega_k t) u_k, \qquad \omega_k \equiv \frac{E_k}{\hbar} \qquad (14-54)$$

وتكون عناصر المصفوفة للحدين H_0 وH_1 هي :

$$(j|H_0|k) \equiv E_k\, \delta_{jk},$$
$$(j|H_1|k) \equiv (u_j,\, H_1 u_k) \qquad (14-55)$$

ويجب أن نلاحظ أن مصفوفة H_0 قطرية كما يتوجب عليها أن تكون ، إذ أن الدالات القاعدية هي دالات مميزة لـ H_0 .

وإذا ضربت معادلة شرودينغر (52—14) بإحدى الدالات الموجية (بمترافقها العقدي)، وأجريت لها مكاملة على طول الاحداثيات جميعها فإن النتيجة هي :

$$(u_j,\, H\psi) = \left(u_j,\, i\hbar\, \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) \qquad (14-56)$$

وبالاستفادة من المعادلات (54—14) و(55—14)، يمكن اختزال ذلك ليؤول الى :

$$\frac{dc_j}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_k (j|H_1|k) c_k \exp(i\omega_{jk} t), \qquad \omega_{jk} \equiv \omega_j - \omega_k \quad (14-57)$$

وتكون جملة المعادلات هذه مكافئة تماماً لمعادلة شرودينغر في كونها تمكننا من حساب التبعية الزمنية للمعاملات C_i ، وبالتالي ، حساب التبعية الزمنية للدالة الموجية . وتكون جملة الدالات دقيقة تماماً ، فلم يجر حتى الآن أي تقريب . إن هذه الطريقة في التعبير عن معادلة شرودينغر معروفة من قبلنا تحت اسم تمثيل المفاعلة (انظر الفصل الحادي عشر).

ويجب أن نلاحظ من المعادلة (57—14) أنه عندما يتلاشى الحد الاضطرابي H_1 ، تكون المعاملات C_i في الطرف الأيمن من المعادلة (57—14) وحساب تبعيتها الزمنية دون أن توضع في الحسبان التبعية الضمنية للزمن في الطرف الأيمن من المعادلة .

فمثلاً ، إذا كان لدينا في اللحظة $t = 0$ الشروط الأولية :

$$c_0(0) = 1 \quad \text{and} \quad c_k(0) = 0; \quad k \neq 0 \qquad (14-58)$$

فإن الحل التقريبي لأجل C_i سوف يعطى عندئذ بالعلاقة :

$$c_j(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t (j|H_1|0) \exp(i\omega_{j0} t)\, dt \qquad (14-59)$$

تكون هذه المعادلة صالحة فقط إذا كانت القيم الناتجة لأجل C_iصغيرة بما فيه الكفاية لكي تؤدي إلى تغير صغير جداً ، وذلك عندما يتم تعويضها في الطرف الأيمن من المعادلة (14—57). وإذا كان الحد الاضطرابي يتمتع بالشكل التالي :

$$H_1 = A \cos \omega t \qquad (14-60)$$

فإننا سنحصل وكنتيجة للمكاملة الماثلة في المعادلة (14—59)، على العلاقة الآتية :

$$c_j(t) = -\frac{1}{2\hbar}(j|A|0)\left\{\frac{\exp[i(\omega_{j0}-\omega)t]-1}{\omega_{j0}-\omega}+\frac{\exp[i(\omega_{j0}+\omega)t]-1}{\omega_{j0}+\omega}\right\} \qquad (14-61)$$

وواضح من هذه المعادلة أنه لكي يطرأ ازدياد قابل للتقدير على احتمالية وجود النظام في حالة طاقية محددة ، لابد أن يكون مخرج أحد التعبيرين اللذين يقعان بين قوسين صغيراً جداً . وبكلام آخر ، يتوجب ـ ولأجل الحصول على احتمالية انتقال (بين الحالات الطاقية) قابلة للتقدير ـ أن يسود الشرط التالي القريب من شرط الرنين :

$$|\omega_{j0}| \approx \omega \qquad (14-62)$$

ويجب مقارنة هذه النتيجة بتلك التي حصلنا عليها في الفصل الثاني عشر ، أنجز الحل الدقيق لمسألة هي ، من حيث الجوهر ، المسألة الراهنة نفسها .

حينما ندرس المعادلة (14—61)، يتضح أن واحداً فقط من الحدين الواقعين بين قوسين يمكنه أن يكون رنيناً (باتساع قابل للتقدير !)، وذلك في حال تحقق المعادلة (14—62). أما الحد الآخر ، فيمثل اضطراباً صغيراً عالي التردد يطرأ على الحالة الطاقية ، ومن الممكن ـ عادةً ـ تجاهله بسبب كبر مخرجه $(|\omega_{j0}| + \omega)$.

وإذا كان النظام قيد البحث هو الذي عولج معالجة دقيقة في الفصل الثاني عشر نفسه ، أي نظم جسيم برمه $\mathcal{B}_0$ يقع في مجال مغنطيسي ساكن موحد $\frac{1}{2}$ ، يمكن عد الاضطراب من المعادلة (14—60) يملك الشكل التالي :

$$H_1 = -\mu \cdot \mathcal{B} \cos \omega t \qquad (14-63)$$

حيث أن $\mathcal{B}_0 \perp \mathcal{B}$ يمثل مجالاً مغنطيسياً تذبذبياً ذا استقطاب مستو يشكل زوايا

قائمة مع المجال المغنطيسي الساكن الكبير الذي يؤثر في الجسيم . وفي هذه الحالة ، يكون الحد ضد ـ الرنيني في المعادلة (61—14) موافقاً لواقع أن المجال الاضطرابي يتذبذب أكثر من كونه يدور في اتجاه مبادرة البرم الالكتروني . ويمكن تفكيك المجال التذبذبي ذا الاستقطاب المستوي إلى مجالين دوّارين يدور أحدهما مع البرم ويدور الآخر بعكسه ، وهما في الحالة السابقة يوافقان الحدين الواقعين بين قوسي المعادلة . (61—14)

لنلاحظ من جهة أخرى ، أنه إذا تم تطبيق مجال اضطراب دوراني مناسب ، فإن الشرط المفروض من خلال المعادلة (61—14) يؤدي إلى الرنين ، بصرف النظر عن إشارة ω_{j0} . فيزيائياً ، تتوافق حالة $\omega_{j0} > 0$ مع امتصاص الفوتون ، حيث يتم انتقال الطاقة إلى نظام البرم من المجال الكهرمغنطيسي : يتعرض البرم للانتقال من حالة طاقية أدنى إلى حالة أعلى . ومن الناحية الثانية ، وعندما يكون $\omega_{j0}<0$ ، يتم انتقال الطاقة من نظام البرم إلى المجال الكهرمغنطيسي . وتعرف هذه العملية باسم **الانبعاث المحتث أو المحفّز** . لذلك ، واضح أن المجال الاضطرابي الذي يتسبب في امتصاص الفوتون من قبل البرم في حالة الطاقة الأدنى ، هو نفسه الذي يتسبب في انبعاث الفوتون عن البرم في حالة الطاقة الأعلى ، **وباحتمالية متساوية** . ويمكن في النظام الحجمي لانتقال الطاقة النقي أن يحدث فقط إذا وجدت في أحد مستويي الطاقة زخوم برم أكثر عدداً منها في المستوى الآخر .

سيتم إسقاط أحد الحدين في المعادلة (61—14) أثناء العرض اللاحق كونه ضد ـ رنيني . ولكي تكون الأمور محددة ، سنفترض أن $E_j>E_0$ ، مما يعني إمكان كتابة المعادلة على الشكل التالي :

$$c_j(t) = -\frac{1}{2\hbar}(j|A|0)\frac{\exp[i(\omega_{j0}-\omega)t]-1}{\omega_{j0}-\omega} = \frac{-it(j|A|0)}{2\hbar}\exp\left(\frac{i\Delta\omega t}{2}\right)\frac{\sin(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega t/2} \quad (14-64)$$

حيث أجرينا التبديل :

$$\Delta\omega \equiv \omega_{j0}-\omega \quad (14-65)$$

ومن هنا نجد أن :

$$|c_j(t)|^2 = \frac{t^2|(j|A|0)|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{(\Delta\omega t/2)^2} \qquad (14-66)$$

وهذه دالة مستدقة بحدة شديدة حول التردد الذي يحدده شرط الرنين $\Delta\omega = 0$ كما كان متوقعاً .

ويجب أن نلاحظ التبعية التربيعية للزمن (لأجل قيم t الصغيرة)، فهذه التبعية تبدو متناقضة لأول وهلة ، إذ أن عدد الفوتونات ، التي تستحث الانتقال ، يتناسب طرداً ، ليس مع عدد الفوتونات المستحثة ، بل مع مربع هذا العدد . ولكن المفارقة تجد حلها إذا لاحظنا أن الإشعاع (أحادي اللون)، والذي يؤثر لمدة t ، إنما هو فعلياً نبضة إشعاعية طولها t ونبضة كهذه لها طاقة متوزعة على نطاق ترددات مقدار عرضه - ومن حيث المرتبة - يساوي المقدار المقلوب لطول النبضة ، وعليه ، فإن طاقة النبضة ، وفي مجال واحدي من الترددات ، في مركز التوزيع الطيفي تتناسب طرداً مع مربع طول النبضة .

يكون المرء في الكثير من المواقف الهامة والمثيرة معنياً ليس فقط بالانتقالات إلى الحالة النهائية المنفردة j ، بل وبالانتقالات الممكنة إلى أية مجموعة من الحالات النهائية ، والتي تملك جميعها الطاقة نفسها تقريبياً (وبالتالي تكون كلها « في الرنين »). ويمكن في مثل هذا الوضع تعريف **احتمالية الانتقال** ω بوصفها احتمالية حدوث الانتقال خلال واحدة الزمن ، أي بشكل مستقل عن الزمن . وتعطى احتمالية الانتقال بالعلاقة التالية :

$$w \equiv \frac{1}{t} \sum_j |c_j(t)|^2 \qquad (14-67)$$

وإذا افترضنا أن الحالات النهائية في المجموعة متوزعة على نحو متصل (أو شبه متصل) من حيث الطاقة ، وأن $n(E)$ هو عدد الحالات الطاقية في نطاق طاقة واحدي ، فإن إجراء الجمع في المعادلة(14-67) ، يمكن استبداله بعملية المكاملة الآتية :

$$w = \frac{1}{t} \int |c_j(t)|^2 n(E)\, dE \qquad (14-68)$$

حيث : j - متغير يتحدد بالعلاقة $E_j = E$. بالجمع بين هذه المعادلة والمعادلة

(14−66)، نتوصل الى :

$$w = \frac{t}{4\hbar^2} \int |(j|\mathbf{A}|0)|^2 n(E) \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{(\Delta\omega t/2)^2} dE \qquad (14-69)$$

وبما أن :

$$E = E_j = E_0 + \hbar\omega_{j0} \qquad (14-70)$$

فإننا نستنتج من المعادلة (14−65) أن :

$$dE = \hbar\, d(\Delta\omega) \qquad (14-71)$$

وواضح للعيان أن $\sin^2(\Delta\omega t/2)/(\Delta\omega t/2)^2$ دالة مستدقة بشكل حاد حول النقطة $\Delta\omega = 0$ ، ولذلك فإنها لمقاربة جيدة ـ في العادة ـ أن نعالج $n(E)$ بوصفها ثابتاً على طول النطاق الذي تكون الدالة فيه كبيرة . وإذا افترضنا لاحقاً أن $|(j|\mathbf{A}|0)|$ كمية متساوية ، من حيث الجوهر ، وذلك لأجل جميع الحالات النهائية في التوزيع ، فإنه يصبح باستطاعتنا كتابة المعادلة (14−69) بالشكل التالي :

$$\begin{aligned} w &= \frac{|(j|\mathbf{A}|0)|^2}{2\hbar} n(E_j) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{(\Delta\omega t/2)^2} d\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right) \\ &= \frac{\pi |(j|\mathbf{A}|0)|^2 n(E_j)}{2\hbar} \end{aligned} \qquad (14-72)$$

وتكون احتمالية الانتقال تابعة زمنياً كما ذكرنا سابقاً .

14−4 التقنيات التغيُّرية .

تستخدم الطرائق الاضطرابية ، التي عُولجت أعلاه ، عندما تكون المسألة التي هي قيد الحل مختلفة اختلافاً قليلاً عن مسألة ذات حل معروف . ولكن ، وحتى عندما لايكون الأمر هكذا ، فيمكن الحصول على معلومات هامة ذات طبيعة محددة ، وذلك باستخدام ما يسمى **الطريقة التغيُّرية** . فهذه الطريقة تسمح بتقدير دقيق تماماً لبعض المستويات الطاقية للنظام ، وعلى وجه التحديد ، لطاقةِ حالته الدنيا بعيداً عن ضرورة المعرفة المفصلة الدقيقة للدالة الموجية .

إن الفكرة الأساسية في الطريقة التغيُّرية هي التالية : تعطي القيمة المتوقعة لمؤثر هاملتون الطاقة المتوسطة للنظام في الحالة الموافقة لدالة معينة تُستخدم في تقدير القيمة المتوقعة . ومن الواضح أن الطاقة المتوسطة يجب أن تكون أكبر أو تساوي الحالة الطاقية الأدنى للنظام . وبالتالي ، فإن :

$$\langle \mathrm{H} \rangle \equiv (\psi, \mathrm{H}\psi) \geq E_0 \qquad (14-73)$$

يمكّننا انتماء الحالة الطاقية الأدنى الى نطاق أدنى من القيمة المتوقعة من اختبار دالة موجية ذات ذيل تتضمن عدداً من المعالم ، ثم إيجاد النهاية الأصغرية للقيمة المتوقعة ، وذلك من خلال تغيير هذه المعالم ؛ ومن هنا التسمية : الطريقة التغيرية . ومن المثير للاهتمام أن دالةً من الدالات ، التي قد تعدُّ مقاربةً ركيكة للدالة الموجية في الحالة الدنيا ، يمكنها أن تقدم ـ وعلى الرغم من ذلك ـ مقاربةً جيدةً لطاقة الحالة الدنيا المقدَّرة كقيمة متوقعة ووفقاً للمعادلة (14−73) .

ولكي نرى كيف يحدث ذلك ، سنفترض أن الدالة ذات الذيل تقبل النشر بلغة الحالات الطاقية المميزة لمؤثر هاملتون :

$$\psi = \sum_k c_k u_k \qquad (14-74)$$

وإذا عوضنا هذا النشر في المعادلة الخاصة بالقيمة المتوقعة لمؤثر هاملتون ، نحصل على المعادلة :

$$\langle \mathrm{H} \rangle = \sum_k |c_k|^2 E_k \qquad (14-75)$$

نلاحظ أن هذه المعادلة تتضمن فقط المربعات المطلقة للمعاملات c_k ، ولذلك فإن c_k التي توافق الحالة المهيجة ، يجب أن تكون من مرتبة 0.1 ، وكذلك أن تساهم في القيمة المتوقعة للطاقة فقط بمقدار من مرتبة 1% . وكنتيجة ، فإن دالة موجية مشوهة بشكل أسوأ ، يمكن أن تعطي قيمة معقولة لأجل الطاقة الأدنى .

وفي هذه الحالة ، يتوجب على المرء أن يحزر بفطنةٍ الشكل التقريبي للدالة الموجية ، مفترضاً وجود صيغة دالية تتضمن معالم حرَّة :

$$\psi = \psi(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, r) \qquad (14-76)$$

بعدئذٍ ، يجري تغيير مختلف المعالم الحرة λ_j حتى تبلغ القيمة المتوقعة **للطاقة** نهايةً أصغرية :

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \lambda_j} = 0 \qquad (14-77)$$

وكمثال على هذه التقنية ، سندرس الحالة الدنيا لذرة الهليوم . فإذا افترضنا النواة مركزاً ثابتاً للقوى وأهملنا كلاً من المفاعلة البرمية ـ المدارية والمفاعلات بين العزمين المغنطيسيين الالكترونيين ، فسيكون مؤثر هاملتون كالتالي :

$$H = \frac{1}{2m}(P_1^2 + P_2^2) - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (14-78)$$

ولنفترض أن الدالة الموجية لذرة الهيليوم هي جداء دالتين موجيتين لذرتي هيدروجين تتضمنان Z بمثابة معلم حر يمكن تغييره . وتعطى الدالة الموجية المستنظمة في هذه الحالة بالعلاقة التالية :

$$\psi = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right) \exp\left[-\frac{Z}{a_0}(r_1 + r_2)\right] \qquad (14-79)$$

ويجب أن نلاحظ ، وفي إطار التبرير لاختيار الدالة الموجية على هذا النحو ، أنه لو تم إهمال حد المفاعلة في مؤثر هاملتون وعدُّ Z مساوياً الاثنين ، لكانت الدالة المختارة دالة موجية دقيقة . وبالتالي ، إذا افترضنا أن الحد المرتبط بالمفاعلة الالكترونية ، وضمن مؤثر هاملتون (الحد الأخير)، يتميز بتأثير ثانوي نسبياً على حركة الالكترونين ، فإنه يجب أن نتوقع تغيراً ثانوياً ، نوعاً ما ، وذلك بنتيجة إدخال هذا الحد . ولأجل تقدير القيمة المتوقعة لمؤثر هاملتون ، دعونا نقسمه الى ثلاثة أجزاء :

$$\langle H \rangle = 2\left\langle \frac{1}{2m} P_1^2 \right\rangle - 4\left\langle \frac{e^2}{r_1} \right\rangle + \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle \qquad (14-80)$$

وواضحٌ من تناظر مؤثر هاملتون والدالة الموجية أنه من الضروري تقدير القيمة المتوقعة لواحدة فقط من الطاقتين الحركيتين ومن ثم ضربها باثنين . وكذلك الأمر فيما يخص طاقة الالكترون الكامنة بالنسبة للنواة كما هو مبين في (80—14) ويمكن تقدير أول قيمتين متوقعتين في المعادلة (80—14) بسهولة شديدة إذا تذكرنا شيئاً ما حول

الطاقة الحركية المتوسطة لالكترونٍ يتحرك في مجال قوة كولومي . فيمكن أن نبين بوساطة **المبرهنة التحويلية**(*) أن الطاقة الحركية المتوسطة للجسيم ، الذي يقوم بحركة كلاسيكية في مجال قوة يخضع لقانون تربيعي مقلوب ، تساوي القيمة السالبة لطاقة الجسيم الاجمالية . وبالتالي ، فان القيمة المتوقعة للطاقة الحركية ، والتي تظهر بمثابة الحد الأول في المعادلة(80—14) يمكن تقديرها بمجرد أن نأخذ طاقة الترابط لدى ذرة الهيدروجين في حالتها الدنيا ، ونعدُّ شحنة النواة مساوية Z ونغير الاشارة :

$$\left\langle\frac{1}{2m}\,P_1^2\right\rangle = \frac{1}{2}\,mc^2Z^2\alpha^2 = \frac{1}{2}\,\frac{Z^2e^2}{a_0} \qquad (14-81)$$

وبشكل مماثل ، تكون القيمة المتوسطة لطاقة الالكترون الكامنة في ذرة الهيدروجين مساوية ضعف طاقة الترابط لدى الالكترون في الحالة الدنيا :

$$\left\langle\frac{Ze^2}{r_1}\right\rangle = -\frac{Z^2e^2}{a_0} \qquad (14-82)$$

وهكذا ، فإن :

$$\left\langle\frac{e^2}{r_1}\right\rangle = -\frac{Ze^2}{a_0} \qquad (14-83)$$

إن التكامل الوحيد ، الذي يسبب بعض المضايقة ، هو ذلك المتعلق بالحد الأخير في المعادلة (80—14)، ويمكن استخدام حيلة لتقدير هذا التكامل . فشكله مطابق لشكل التكامل الخاص بالمفاعلة بين توزيع شحنة كروية وتوزيع شحنة كروية أخرى متموضعة حول الأولى . ويتوجب تقدير التكامل بوساطة إجراء مكاملة للجداء الحاصل عن ضرب توزيع إحدى الشحنتين بالدالة الجهدية للشحنة الأخرى . فإذا قدَّرنا التكامل بهذه الطريقة ، نحصل على :

$$\left\langle\frac{e^2}{r_{12}}\right\rangle = \int \bar{\psi}\,\frac{e^2}{r_{12}}\,\psi\,dr_1\,dr_2 = \frac{5}{8}\,\frac{Ze^2}{a_0} \qquad (14-84)$$

ولذلك فإن :

$$\langle H\rangle = \frac{Z^2e^2}{a_0} - \frac{4Ze^2}{a_0} + \frac{5}{8}\,\frac{Ze^2}{a_0} \qquad (14-85)$$

---

* انظر مثلاً :

(*) H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass., 1950, Chapter 3.

حيث يمكن تغيير المعلم Z لبلوغ النهاية الأصغرية للقيمة المتوقعة بالنسبة للطاقة :

$$\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial Z} = 0 \qquad (14-86)$$

وتُسفر هذه المعادلة عن النتيجة التالية :

$$Z\Big|_{\langle H\rangle=\text{minimum}} = \frac{27}{16} \approx 1.69 \qquad (14-87)$$

وبتعويض قيمة Z هذه في المعادلة (14-85)، نحصل على القيمة التقريبية لطاقة الترابط لدى ذرة الهيليوم :

$$E_0 \approx \langle H\rangle = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} \approx -2.85\,\frac{e^2}{a_0} \qquad (14-88)$$

وهذه هي الطاقة الضرورية لإخراج الالكترونين من ذرة الهيليوم ، أي الطاقة الضرورية للحصول على هيليوم مضاعف التأيُن . وتكون القيمة التجريبية لهذه الطاقة هي :

$$E_0 = -2.904\,\frac{e^2}{a_0} \qquad (14-89)$$

وهذا توافق ممتاز مع التقريب إذا ما وضعنا في حسباننا الركاكة الأخيرة في الحساب .

14-5 طريقة و. ك. ب. (وينتزل - كرامرز - بريُّو).

Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)

سندرس كنموذج أخير من الحسابات التقريبية تقريب وينتزل - كرامرز - بريُّو (و. ك. ب.)، ويطبَّق هذا التقريب على المواقف التي تكون الطاقة الكامنة فيها دالة بطيئة التغير بالنسبة للموضع . ويمكن بوساطة هذه الطريقة معالجة المسائل وحيدة البعد والمسائل ثلاثية الأبعاد ، والتي يمكن اختزالها الى مسألة وحيدة البعد (شعاعية).

ونعني بالكمون « بطيء التغير » كموناً V يتغير ، ولكن بشكل طفيف ، في منطقةٍ طولها يساوي عدة من أضعاف موجة دي برولي (انظر الشكل (14-3)). ويساوي طول موجة دي برولي ، المرفق بالجسيم الذي يحمل طاقة E في منطقة الكمون V ، ما يلي :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{[2m(E - V)]^{1/2}} \qquad (14-90)$$

ونظراً لأن الكمون يتغير بالنسبة للموضع تغيراً بطيئاً لدرجة نستطيع معها الافتراض بأن هذا الكمون ثابت ضمن منطقة صغيرة . عندئذٍ ، وضمن هذه المنطقة الصغيرة ، يكون للدالة الموجية شكل موجة مستوية وثابت الانتشار لأجل موجة مستوية كهذه هو :

$$k = \frac{\{2m[E - V(x)]\}^{1/2}}{\hbar} \qquad (14-91)$$

وإن مطلب كون الكمون بطيء التغير يمكن التعبير عنه بالشرطين التاليين :

$$\left|\frac{1}{k^3}\frac{d^2k}{dx^2}\right| \ll 1 \qquad \left|\frac{1}{k^2}\frac{dk}{dx}\right| \ll 1 \qquad (14-92)$$

ومن المتوقع أن يكون للدالة الموجية الشكل التالي :

$$\psi_{\pm}(x, t) = \frac{1}{k^{1/2}} \exp\left[\pm i \left(\int^{x} k\, dx \mp \omega t\right)\right] \qquad (14-93)$$

حيث :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \qquad (14-94)$$

مما يعني أننا نتوقع حلاً على شكل أمواج مستوية تنتشر في الاتجاهين$(x+)$ و$(x-)$ ، وتتغير ثوابت انتشارها بالتدريج من منطقة الى أخرى . وقد تم استخدام العامل $1/k^{1/2}$ للتأكيد على أن احتمالية العثور على الجسيم في نقطة معينة من الفراغ تتناسب عكساً مع السرعة الكلاسيكية للجسيم في تلك النقطة . لذلك ، فنحن نتوقع ـ وعلى أساس اعتبارات فيزيائية ـ أن هذا سيكون حلاً ملائماً في حالة الكمون الذي يتغير بما يكفي من البطء .

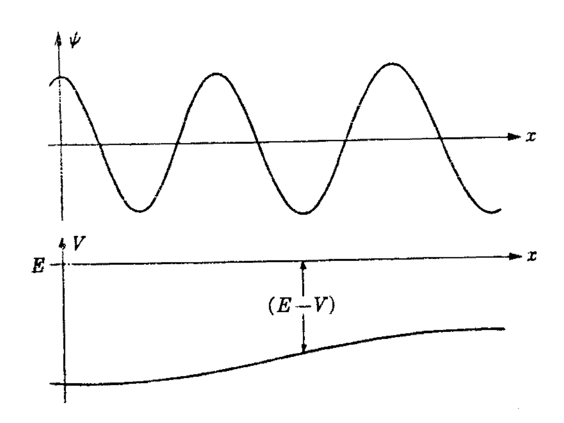
وإذا عوضنا المعادلة (93-14) في معادلة شرودينغر وحيدة البعد :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (14-95)$$

نحصل على :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[-\tfrac{1}{2}k''k^{-3/2}+\tfrac{3}{4}k'^2k^{-5/2}-k^{3/2}]k^{1/2}\psi+V\psi=E\psi \quad (14-96)$$

ويمكن بحكم المتراجحتين (14-92) تجاهل الحدَّين الأولَيْن ما بين القوسين .



الشكل 14 −3 : جهد « بطيء التغير » ، نموذجي ، في حالة البعد الواحد ، مع الدالة الموجية المرافقة له . لنلاحظ أن طول الموجة هو دالة بطيئة التغير ، بالنسبة للموضع ، أي أن تغيرها الجزئي صغير ، داخل طول الموجة الواحد .

وبعد التعويض من المعادلة (14-91)، يتضح أن المعادلة (14-93)هي ، وبالنسبة لهذا التقريب ، حلٌ لمعادلة شرودينغر .

تكون العلاقة الوثيقة بين تقريب (و. ك. ب.) والتوصيف الكلاسيكي لحركة الجسيم واضحة ، وذلك من حيث أن طول الموجة واتساعها في أية نقطة يُعطيان من خلال الزخم الكلاسيكي في تلك النقطة .

وضمن المنطقة التي يكون فيها $E < V$ لايعود الشكل التذبذبي للحل المعطى بالمعادلة (14-93) مسموحاً به ، وذلك لأن « ثابت الانتشار »(14-91) يصبح خيالياً . وعوضاً عن ذلك ، يتوجب أن يتخذ الحل شكلاً أُسياً . فلأجل الكمون بطيء التغير ، نتوقع أن يكون الحل في المنطقة الممنوعة كلاسيكياً $E < V$ ، وبالمقارنة مع المعادلة (14-93) هو :

$$\psi_{\pm}(x, t) = \frac{1}{\gamma^{1/2}} \exp\left[\pm\left(\int^{x} \gamma\, dx \mp i\omega t\right)\right] \qquad (14-97)$$

حيث :

$$\gamma = \frac{\{2m[V(x) - E]\}^{1/2}}{\hbar} \qquad (14-98)$$

وهكذا ، فإن الدالة الموجية تتزايد ، أو تتناقص ، أُسِّياً حينما تتم الحركة من « نقطة الانعطاف » الكلاسيكية ، حيث $V = E$. *وإذا افترضنا أن* V كمون « بطيء التغير » في المنطقة الممنوعة كلاسيكياً ، [حيث المتراجحتان (14−92)صالحتان] ، سنجد أن المعادلة (14−96) ذات k الخيالي أيضاً سارية المفعول ، وأن المعادلة (14−97) هي حل تقريبي لمعادلة شرودينغر .

وهكذا ، أوجدنا الحلول التقريبية للمنطقتين اللتين تتحقق فيهما المعادلة (14−92)، أي حيث الكمون يتغير ببطء في منطقة تشمل عدداً من أطوال موجة دي برولي . لكنه من الواضح أن المنطقتين $V < E$ و $V > E$ ، حيث حلول (و. ك. ب.) صالحة تفصل بينهما « نقطة الانعطاف » $(V = E)$ والتي يضمحل فيها ثابت الانتشار ويصبح طول الموجة لانهائياً . فبالرغم من فشل الطرائق الواردة أعلاه في جوار هذه النقطة ، يمكن تحديد حل مناسب ، وذلك بوساطة تقريب التغير الفعلي للكمون $V(x)$ حول النقطة x_0 ليكون تغيراً خطياً :

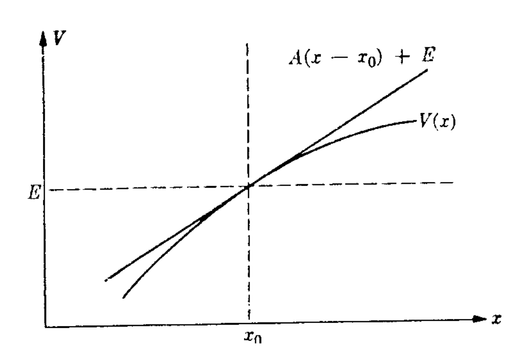
$$V(x) = A(x - x_0) + E \qquad (14-99)$$

(انظر الشكل (14−4)). ويفترض هذا التقريب الخطي للكمون أن يكون صالحاً ضمن منطقة صغيرة على كل من جانبي نقطة الانعطاف . وعندئذٍ يمكن حل معادلة شرودينغر بدقة لأجل هذه المنطقة ، ويمكن استعمال الحلول الناتجة للملاءمة بين الحلين (14−93) و (14−97) واللذين يصلحان بعيداً عن نقطة الانعطاف .

وبفرض أن المنطقة الممنوعة كلاسيكياً تقع من جهة $x +$ ، بالنسبة لنقطة الانعطاف x_0 ، تتخذ حلول معادلة شرودينغر قرب x_0 الشكل التالي :

$$\psi_{+}(x) = C_{\pm} k J_{\pm 1/3}\left(\int_{x}^{x_0} k\, dx\right), \qquad E > V \quad (\text{or } x < x_0),$$

$$\psi_{\pm}(x) = \mp C_{\pm} \gamma I_{\pm 1/3}\left(\int_{x_0}^{x} \gamma\, dx\right), \qquad V > E \qquad (14-100)$$



الشكل 14 — 4 . الطاقة الكامنة الفعلية في نقطة الانعطاف الكلاسيكية والتقريب الخطي للجهد الفعلي ، الذي يصْلح في جوار نقطة الانعطاف . .

حيث : I دالة بسِّل ذات المتغير الخيالي ، وحيث تم اختيار الثوابت بما يضمن ملاءمة الحلَّين بشكل أملس في النقطة x_0 .

إن الخطوة الأخيرة في تطبيق تقريب (و. ك. ب.) هي ملاءمة الحلين $\psi_\pm$ من المعادلتين (14—100) مع الحلين (14—93) و (14—97). وبغية انجاز ذلك ، يتوجب تحديد السلوك المقارب للحلين وللمعادلة (14—100) في جوار نقطة الانعطاف :

$$\psi_+ \xrightarrow[x\to+\infty]{} -\frac{1}{(2\pi\gamma)^{1/2}}\left[\exp\left(\int_0^x \gamma\,dx\right) + \exp\left(-\int_0^x \gamma\,dx - \frac{5\pi i}{6}\right)\right],$$

$$\psi_+ \xrightarrow[x\to-\infty]{} \frac{1}{(2\pi k)^{1/2}}\cos\left[\int_x^0 k\,dx - \frac{5\pi}{12}\right], \qquad (14-101)$$

$$\psi_- \xrightarrow[x\to+\infty]{} \frac{1}{(2\pi\gamma)^{1/2}}\left[\exp\left(\int_0^x \gamma\,dx\right) + \exp\left(-\int_0^x \gamma\,dx - \frac{\pi i}{6}\right)\right],$$

$$\psi_- \xrightarrow[x\to-\infty]{} \frac{1}{(2\pi k)^{1/2}}\cos\left[\int_x^0 k\,dx - \frac{\pi}{12}\right]$$

ولايمكن على نحو ملائم تطبيق هذه الصيغ الخاصة بالسلوك المقارب ، لأنها تتضمن دالتين أسيتين إحداهما متزايدة والأخرى متناقصة عندما $x\to+\infty$
ولكنه يمكن إيجاد علاقات الترابط من خلال أخذ التراكيب الخطية الملائمة :

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{\gamma^{1/2}}\exp\left(-\int_{x_0}^{x}\gamma\,dx\right)\rightarrow\frac{1}{k^{1/2}}\cos\left[\int_{x}^{x_0}k\,dx-\frac{\pi}{4}\right],$$

$$\sin\eta\,\frac{1}{\gamma^{1/2}}\exp\left(\int_{x_0}^{x}\gamma\,dx\right)\leftarrow\frac{1}{k^{1/2}}\cos\left[\int_{x}^{x_0}k\,dx-\frac{\pi}{4}+\eta\right] \qquad (14-102)$$

وتتخذ η هنا أية قيمة لاتجعل $\sin\eta$ قريبة من الصفر . ويشير السهمان في المعادلة (14-102) الى أن الوصل سوف يتم بالاتجاه الموافق لتزايد الدالة الأسية ؛ فاذا تم الوصل في الاتجاه المعاكس ، فسوف يُبعِد الخطأ الطوري الطفيف (الناجم عن التقريب في حالة الصيغة الأولى) الدالة الأسية (المسيطرة) المتزايدة ، وذلك بعيداً عن نقطة الانعطاف ؛ بينما يؤدي تجاهل التزايد في الدالة الأسية باتجاه نقطة الانعطاف (حالة الصيغة الثانية) الى وقوع خطأ طوري كبير في الحل التذبذبي .

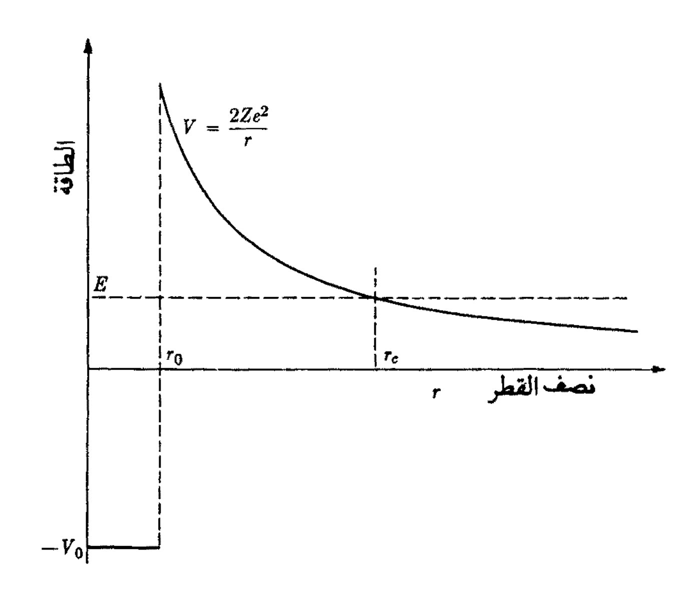
وكمثال على استخدام طريقة (و. ك. ب.) سندرس اضمحلال جسيمات ألفا في النوى المشعة . ويمكن تبسيط المسألة إذا افترضنا أن جسيم ألفا هو جسيم ذو شحنة $Z = 2e$ وكتلة M داخل بئر كمون نووية محاطة بحاجز كولومي . فعندئذٍ ، يقوم جسيم ألفا ب « الاختراق النفقي » للحاجز كما ورد في الفصل الثالث . ويكون الافتراض اللاحق ، والذي سنقوم به ، هو أن الجسيم ألفا ينطلق من الحالة S ، حيث لايوجد ـ لهذا السبب ـ مساهمة من قبل التأثيرات النابذة مركزياً في الحاجز الكموني الفعال . ونعرض في الشكل (14-5) الطاقة الكمونية للجسيم كدالة تابعة للمسافة التي تفصله عن مركز النواة ، حيث افترضنا أن الكمون النووي ثابت $(V=-V_o)$. إن r_0 هو نصف قطر النواة ، ويرمز r_c الى نصف القطر الذي تصبح الطاقة الحركية لجسيم ألفا مساوية عنده الصفر خارج النواة . ولكي يتعرض الجسيم ألفا للاضمحلال يجب أن تكون لديه طاقة موجبة E .

وكما رأينا في الفصل العاشر ، يتم اختزال المسألةالى مسألة وحيدة البعد (شعاعية)، حيث تؤول معادلة القيمة المميزة للطاقة الى :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)\right]u=Eu, \qquad (14-103)$$

حيث :

$$u=r\psi, \qquad u(0)=0 \qquad (14-104)$$



الشكل 14–5 نموذج مُبسّط للكمون الشعاعي الموافق لنواة مهيأة لحدوث اضمحلال ألفا. ويقع الجُسَيم ألفا في بئر كمونية تجاذبية قوية داخل النواة. وتستدعي شحنة النواة «الحاجز الكولومي» القوي الذي يتوجب على جُسَيْم ألفا أن يخترقه لكي يغادر النواة.

ويمكن كتابة حلول هذه المعادلة لأجل المناطق الثلاث التي تفصل بينها النقطتان r_0 و r_c مما يجعل ممكناً، عندئذٍ، وَصْلُها عبر هاتين النقطتين:

$$
\begin{aligned}
u(r) &= \sin(kr), && 0 < r < r_0, \\
&= \frac{A}{\gamma^{1/2}} \exp\left(\pm\int_{r_0}^{r} \gamma \, dr\right), && r_0 < r < r_c, \qquad (14-105) \\
&= \frac{B}{(k')^{1/2}} \exp\left(\pm i\int_{r_c}^{r} k' \, dr\right), && r > r_c
\end{aligned}
$$

إن الحل داخل النواة $0 < r < r_0$ هو حل دقيق، بينما استخدمنا طريقة (و. ك. ب.) للحصول على الحلين في المنطقتين الأخريين. وتعرف الثوابت

k ، γ ، k' بالعلاقات التالية :

$$k \equiv \frac{[2M(E+V_0)]^{1/2}}{\hbar}, \quad 0 < r < r_0,$$
$$\gamma \equiv \frac{[2M(V-E)]^{1/2}}{\hbar}, \quad r_0 < r < r_c, \qquad (14-106)$$
$$k' \equiv \frac{[2M(E-V)]^{1/2}}{\hbar}, \quad r > r_c$$

ومن الملائم إعادة كتابة الحل الخاص بمنطقة $r_0 < r < r_c$ ، كالآتي :

$$u(r) = \frac{A}{\gamma^{1/2}} \exp\left(\mp\int_{r_0}^{r_c} \gamma\, dr\right) \exp\left(\pm\int_{r}^{r_c} \gamma\, dr\right)$$
$$= \frac{A'}{\gamma^{1/2}} \exp\left(\pm\int_{r}^{r_c} \gamma\, dr\right) \qquad (14-107)$$

وأثناء اضمحلال ألفا ، لاتنشأ أمواج مستقرة في منطقة $r > r_c$ ، بل إن الحل ـ عوضاً عن ذلك ـ يوافق موجة كروية تتحرك نحو الخارج . وسوف نرى في الفصل السادس عشر أن ذلك يعني ضرورة امتلاك الحل المذكور للسلوك المقارب :

$$u(r) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \frac{B}{(k')^{1/2}} \exp\left(i\int_{r_c}^{r} k'\, dr + \beta\right) \qquad (14-108)$$

حيث : β ـ ثابت طَوْري ليس له مدلول فيزيائي . ويمكن للمرء أن يحصل على حل كهذا في هذه المنطقة الخارجية ، وذلك بالاستفادة من المعادلة الثانية في المعادلة (14-102). وبفرض أن $\eta = -\pi/4$ تصبح علاقة الملاءمة كالآتي :

$$\frac{1}{(k')^{1/2}} \cos\left(\int_{r_c}^{r} k'\, dr\right) \to \frac{1}{(2\gamma)^{1/2}} \exp\left(\int_{r}^{r_c} \gamma\, dr\right) \qquad (14-109)$$

وإذا أخذنا بالمقابل $\eta = -\pi/4$ فستكون النتيجة :

$$\frac{1}{(k')^{1/2}} \sin\left(\int_{r_c}^{r} k'\, dr\right) \to -\frac{1}{(2\gamma)^{1/2}} \exp\left(\int_{r}^{r_c} \gamma\, dr\right) \qquad (14-110)$$

وعندما نضرب هذه العلاقة بـ $i \equiv \sqrt{-1}$ ونجمعها مع المعادلة (14-109) نجد أن :

$$\frac{i}{(k')^{1/2}} \exp\left[i\left(\int_{r_c}^{r} k'\, dr - \frac{\pi}{4}\right)\right] \to -\frac{i}{\gamma^{1/2}} \exp\left(\int_{r}^{r_c} \gamma\, dr\right) \qquad (14-111)$$

وهي الصيغة المنشودة . وإن تطبيق شرط الملاءمة هذا على الدالتين الموجيتين (14−105) و (14−107)، وعبر النقطة $r = r_c$ ، يؤول إلى علاقة الملاءمة :

$$\frac{A'/\gamma^{1/2}}{B/(k')^{1/2}} = \frac{-i/\gamma^{1/2}}{[1/(k')^{1/2}]\exp(-i\pi/4)} \qquad (14-112)$$

أو أن :

$$B = i\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)A' = (i)^{1/2}A\exp\left(-\int_{r_0}^{r_c}\gamma\,dr\right) \qquad (14-113)$$

وواضح أن الحلّين المتضمنين لدالة أسية سالبة في المعادلتين (14−105) و (14−107) غائبان في هذه الحالة .

تسمح المساواة بين المشتقتين اللوغاريتميتين بإنجاز الوصل الملائم بين الحلين في النقطة $r = r_0$ ، حيث يوجد انقطاع على شكل عتبة (ولكن حيث حلّ (و. ك. ب.) صالح حتى بلوغ النقطة $r = r_0$). وهذا يعني أن :

$$\frac{1}{\sin kr}\frac{d}{dr}\sin kr = k\cot kr_0 = -\gamma_0, \qquad \tan kr_0 = -\frac{k}{\gamma_0} \qquad (14-114)$$

مع العلم أن :

$$\gamma_0 \equiv \gamma(r_0) \qquad (14-115)$$

وإضافة الى ذلك ، يجب على الدالة الموجية أن تكون متصلة في النقطة $r = r_0$ ، ولهذا نجد أن :

$$\frac{A}{\gamma_0^{1/2}} = \sin kr_0 = \left(\frac{\tan^2 kr_0}{1+\tan^2 kr_0}\right)^{1/2} = \left[\frac{(k/\gamma_0)^2}{1+(k/\gamma_0)^2}\right]^{1/2},$$

$$A = \left[\frac{\gamma_0(k/\gamma_0)^2}{1+(k/\gamma_0)^2}\right]^{1/2} \qquad (14-116)$$

وإذا استخدمنا قيمتي A و B السابقتين ، سنجد أن الدالة الموافقة للموجة التي تتسرب من خلال الحاجز الكموني هي :

$$u(r) = \left(\frac{i\gamma_0}{k'}\right)^{1/2}\left[\frac{(k/\gamma_0)^2}{1+(k/\gamma_0)^2}\right]^{1/2}\exp\left(-\int_{r_0}^{r_c}\gamma\,dr\right)\exp\left(i\int_{r_c}^{r}k'\,dr\right), \quad r > r_c \qquad (14-117)$$

وضمن هذه الشروط ، التي تنشأ داخل النواة ، يكون المقدار $(k/\gamma_0)^2$ صغير جداً إذا ما قورن بالواحد ، أي أن ارتفاع الحاجز الكولومي ، الذي يصادفه جسيم ألفا في النواة ، أكبر من الطاقة الحركية في النواة . وبالتالي ، وانطلاقاً من المعادلة (14–114)، نجد أن :

$$\tan kr_0 \approx 0, \qquad kr_0 \approx \pi, 2\pi, \ldots \tag{14–118}$$

وفي هذه الحالة ، تصبح الدالة الموجية الخارجية كالتالي :

$$u(r) = \left(\frac{ik^2}{k'\gamma_0}\right)^{1/2} \exp\left(-\int_{r_0}^{r_c} \gamma\, dr\right) \exp\left(i\int_{r_c}^{r} k'\, dr\right) \tag{14–119}$$

وإنه لمن الملائم أن نستنظم الحل على أساس أن احتمالية العثور على جسيم ألفا داخل النواة تساوي الواحد . (إن الدالة إلتي تنتشر في كامل الفراغ ، والتي تسلك ـ ولأجل قيم r الكبيرة ـ سلوكاً مقارباً من الشكل :

$$\psi \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{A}{r} \exp\left[i\, \frac{(2ME)^{1/2}}{\hbar}\, r\right] \tag{14–120}$$

ليست مستنظمة بطبيعة الحال بالمفهوم الاعتيادي ، وذلك لأن التكامل $\int|\psi|^2\, dr$ يتباعد فيها لو أُجري على كامل الفراغ) . فاحتمالية أن تتضمن النواة جسيم ألفا سوف تساوي الواحد عندما :

$$4\pi \int_0^{r_0} |cu|^2\, dr = 1 \tag{14–121}$$

حيث : c عامل استنظام يُفترض اعتماده لأجل الدالات الموجية لكل من المناطق الثلاث . ويمكن تقدير هذا التكامل بسهولة :

$$4\pi|c|^2 \int_0^{r_0} \sin^2 kr\, dr = 2\pi|c|^2 r_0 = 1, \qquad |c|^2 = \frac{1}{2\pi r_0} \tag{14–122}$$

ومن الواضح أن مقدار اضمحلال ألفا في النواة يتعلق بالتدفق الخارجي للجسيمات عبر سطح كروي $r = R > r_c$ ، وهذا ما يمكن التوصل اليه باستخدام تدفق كثافة الاحتمالية ، والذي أدخلنا مفهومه في الفصل الثالث . فبالانطلاق من المعادلة (3–73)، نجد أن :

$$S = -\frac{i\hbar}{2M}(\bar{\psi}\nabla\psi - \nabla\bar{\psi}\cdot\psi) \qquad (14-123)$$

ومن المعادلتين (14–119) و (14–122)، نجد أن :

$$\psi(r) = \frac{1}{r}\left(\frac{k^2}{2\pi k'\gamma_0 r_0}\right)^{1/2} \exp\left(-\int_{r_0}^{r_c}\gamma\, dr\right)\exp\left(i\int_{r_c}^{r}k'\, dr\right), \qquad r > r_c \qquad (14-124)$$

ويعطي تقدير التدفق الشعاعي لكثافة الاحتمالية من هنا ، ومن المعادلة (14–123) العلاقة التالية :

$$S_r(r) = \frac{\hbar k^2}{2\pi M\gamma_0 r_0 r^2}\exp\left(-2\int_{r_0}^{r_c}\gamma\, dr\right) \qquad (14-125)$$

ويساوي تدفق الجسيمات الخارجي عبر الشق $r = R$ ما يلي :

$$F = 4\pi R^2 S_r(R) = \frac{2\hbar k^2}{M\gamma_0 r_0}\exp\left(-2\int_{r_0}^{r_c}\gamma\, dr\right) \qquad (14-126)$$

وبلغة الطاقة V_0 و r_0 و E ، يكون تدفق الجسيم هو :

$$F = 2\left(\frac{2}{M}\right)^{1/2}\frac{E + V_0}{[V(r_0) - E]^{1/2}}\frac{1}{r_0}\exp\left\{-2\int_{r_0}^{r_c}\frac{[2M(V-E)]^{1/2}}{\hbar}\, dr\right\} \qquad (14-127)$$

ويجب أن يساوي هذا التدفق مقدار التناقص في احتمالية وجود الجسيم داخل النواة (وذلك حين تكون الاحتمالية واحداً). وتتغير هذه الاحتمالية مع الزمن على النحو التالي :

$$\frac{dP}{dt} = -FP \qquad (14-128)$$

ولذلك ، فإن :

$$P = \exp(-Ft) \qquad (14-129)$$

ويعرَّف نصف عمر النواة ، وبالنسبة لاضمحلال ألفا ، على أنه الزمن الذى تكون الاحتمالية فيه $P = 1/2$:

$$T_{1/2} \cong \frac{\ln 2}{F} \qquad (14-130)$$

وهذا ما يمكن الحصول عليه بسهولة من المعادلة (14−127).

14−6 خلاصة .

جرت الإشارة الى الحاجة للطرائق التقريبية أثناء إجراء حسابات ميكانيك الكم في جميع الحالات ـ تقريباً ـ التي تتمتع بأهمية غير عادية . وفي البداية نوقشت الحالات الاضطرابية التي يكون النظام قيد البحث فيها مختلفاً ـ ولكن قليلاً ـ عن نظام يمكن حساب سلوكه . وقد عرضنا نظرية الاضطراب التابع زمنياً ، والتي يكون مؤثر هاملتون فيها تابعاً للزمن بوضوح ، ثم طبقناها على المتذبذب غير التوافقي وعلى الايونات ذات المغنطيسية المسايرة في البلورات ، وكذلك على التأثيرات الترابطية البرمية ـ المدارية في الذرات القلوية . كما تمت الاشارة الى تعديلات نظرية الاضطراب الضرورية لمعالجة الحالات الطاقية المفككة .

ثم عالجنا الاضطرابات التابعة زمنياً وحسبنا ـ في تقريب المرتبة الأولى ـ احتمالية الانتقال بين الحالات الطاقية غير المضطربة ، والتي يسببها الاضطراب ؛ وذلك في حالة الانتقال بين مستويين طاقيين بدافع من المجال الكهرمغنطيسي التذبذبي . وجرى عرض التقنيات التغيرية واستخدامها لتقدير طاقة الحالة الدنيا لذرة الهيليوم . وأخيراً ، عالجنا حالة الكمون بطيء التغير ، وذلك بمساعدة تقريب (و. ك. ب.) واستخدمنا هذا التقريب لاستخلاص العلاقة التي تعطي عمر النصف للنواة بالنسبة لاضمحلال ألفا ، وذلك بلغة المعالم الخاصة بالنظام : طاقة جسيم ألفا وعمق بئر الكمون النووية والكمون الكهرساكن الناجم عن شحنة الذرة التي يجري فيها الاضمحلال .

مسائل

14−1 استخلص العلاقة التقريبية لأجل تشعب المستوى الطاقي $(n = 2)$ لذرة الهيدروجين تحت تأثير مجال كهربائي موحد (تأثير ستارك الخطي). ويمكن الحصول على الدالات المميزة غير المضطربة من الجدول (10−1) والمعادلة (9−66). ويجب تجاهل تشعب البنية الدقيقة.

14–2 استخدم الطريقة التغيُّرية لحساب الطاقة الأدنى لذرة الهيدروجين مفترضاً أنه ، وبنتيجة المفاعلة مع الطراز الجديد من المجال النووي ، يطرأ تبدل على المفاعلة الكولومية لتصبح $V = -e^2/(r + r_0)$ ، حيث $0 < r_0 \ll a_0$.

14–3 اكتشف غيغرو نوتال تجريبياً أن طاقة جسيم ألفا يمكن ربطها مع ثابت الاضمحلال $\gamma = 1/T_{1/2}$ الموافق عبر صيغة ذات طابع عام هي $\ln E = a \ln \gamma + b$ ، حيث تتخذ a القيمة نفسها تقريباً لأجل سلاسل الخطوط الاشعاعية الثلاث ، بينما تختلف b من سلسلة الى اخرى . أ) قدِّر قيمة التكامل في الحد الموافق لاختراق الحاجز ضمن التعبير النظري الخاص بـ γ ، وقارن القيمة النظرية التي تنتج لأجل γ مع الصيغة التجريبية . ما الذي يمكن استنتاجه ؟ ب) احسب القيمة التقريبية لقياس النواة ، وذلك بالعودة الى الجدول الذي يعطي ثوابت الاضمحلال وطاقات الاضمحلال لدى المصادر المختلفة لانبعاث جسيمات ألفا .

14–4 التريتيوم $(H)^3$ ناشط اشعاعياً ويضمحل الى $\overset{3}{He}$ مع انبعاث الكترون واحد . وبفرض أن اضمحلال بيتًا للالكترون يمكن تجاهله (نظراً لأن الالكترون يغادر الذرة بسرعة)، يمكن عدُّ هذا الاضمحلال بمثابة تغير فجائي في مقدار الشحنة النووية دون أي تغير في الدالة الموجية للالكترون المداري . (وهذا ما يعرف باسم التقريب « الفجائي »). أ) بفرض أن ذرة التريتيوم كانت في البداية تقع في الحالة الدنيا ، احسب احتمالية العثور على إيون He^+ الناتج في حالته الدنيا فوراً بعد اضمحلال بيتًا . ب) احسب الطاقة المتوسطة التي تم إشعاعها من قبل الذرة بفعل الاضمحلال .

14–5 تؤخذ الطاقة الكامنة للمفاعلة في الجزيء ثنائي الذرات أحياناً على الشكل التالي :

$$V = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}$$

احسب مستويات الطاقة الاهتزازية لجزيء كهذا ، وذلك بالاستفادة من « رقعة القطع الناقص » لهذا الكمون الفعال . عوِّض القيم العددية لـ $HC\ell$ معبراً عن الطاقة بالالكترون فولط .

14–6 لنأخذ متذبذباً غير توافقي وحيد البعد تُعطى طاقته الكامنة بالصيغة $V = \frac{1}{2}kx^2 + Ax^4$ أ) استخدم الطريقة التغيُّرية لحساب المستوى الطاقي الأدنى ، وذلك من خلال اختيار الدالة ذات الذيل $\psi = \alpha u_0 + \beta u_2$ ، حيث U_0 وU_2 دالتان عاديتان للمتذبذب التوافقي . خذ β/α وω بمثابة معلمين تغيريين . ب) قارن هذه النتيجة مع الحسابات الاضطرابية التي أُجريت في النص أعلاه .

14–7 أ) ضمن نظرية الاضطراب المستقل زمنياً ، يمكن كتابة مؤثر هاملتون على الشكل : $H = H_0 + H'$. بيِّن أن :

$$\sum_m |H'_{nm}|^2 = (H'^2)_{nn}$$

لتكن ذرة الهيدروجين في حالتها الدنيا ضمن مجال كهربائي موحد يضطرها للاستقطاب . وليكن H بالنسبة للمجال في الاتجاه Z مساوياً $H = -e\varepsilon z$ ، حيث ε هي شدة المجال الكهربائي . ب) بيِّن أن تدقيق المرتبة الأولى للحالة الطاقية الأولى $\acute{H}_{11}$ يساوي الصفر .

إن التغير الذي يطرأ على الحالة الطاقية الدنيا هو $\Delta W = \frac{1}{2}\alpha\varepsilon^2$ ، حيث هي الاستقطابية ، ومعروف أنها تساوي 0.68×10^{-24} سم^3. ج) بيِّن أن عنصر المصفوفة H'_{1q} متميز عن الصفر فقط لأجل $\ell=1$.

تبين التقديرات البسيطة للكمية $|H'_{1q}|^2$ أنها تتناقص بسرعة مع تزايد n الموافقة للحالة q :

$$\frac{1}{2}\alpha\varepsilon^2 = +\sum_{q\neq 1}\frac{|H'_{1q}|^2}{E_q - E_1}$$

د) بيِّن أن :

$$\frac{1}{2}\alpha\varepsilon^2 < \frac{(H'^2)_{11}}{E_2 - E_1}$$

حيث P هي طاقة الحالة E_2 الأدنى . هـ) احسب هذه النهاية العليا بالنسبة لـ α ، وقارنها مع القيمة التجريبية . التوافق بين القيمتين جيد ، وذلك بسبب التقارب السريع للسلاسل .

14–8 ذرَّتا هيدروجين تفصل بينهما مسافة كبيرة بالمقارنة مع نصف قطر بـور ، وتتجاذب إحداهما نحو الأخرى بوساطة مفاعلة من نمط فان در والس . وهذا يمثل المفاعلة الناجمة عن الاستقطاب المتبادل لكل من الذرتين بسبب الأخرى .

أ) اكتب مؤثر هاملتون لأجل نظام ذرَّتي الهيدروجين بلغة المسافة R الفاصلة بين النواتين وإحداثيَّي الالكترونين r_1 و r_2 المرتبطين على التوافق بالذرتين 1 و 2 ، وذلك بالنسبة الى موضعي هاتين النواتين . عالج هذا النظام بوساطة نظرية الاضطراب آخذاً الذرتين المنفصلتين (ولكن المتفاعلتين) على أنهما نظام غير مضطرب ، ومفترضاً حدود المفاعلة بمثابة اضطراب . ب) بيِّن أن الحد المتضمن لـ R^{-3} سيكون الحد الرئيس في نشر الاضطراب عبر سلسلة قوى .

ج) احسب النهاية الدنيا لشدة التفاعل كدالة تابعة لـ R^{-1} مستخدماً النتيجة الأولى للمسألة (14–7).

14–9 تملك معادلة القيمة المميزة في حالة البعد الواحد :

$$\frac{d^2u_n}{dx^2} - x^2u_n = E_nu_n$$

القيم المميزة $E_n = 2n + 1$ ومصفوفة عناصرها :

$$x_{mn} = \sqrt{\frac{m}{2}}\,\delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{m+1,n}$$

أ) استخدم نظرية الاضطراب لايجاد الحدين المتضمنين على α و α^2 في القيم المميزة للمعادلة :

$$\frac{d^2v}{dx^2} - x^2v - \alpha xv = E'v$$

ب) حدِّد القيم المميزة بدقة وقارنها مع الحسابات الاضطرابية . ج) إذا كان النظام الأصلي يوافق متذبذباً توافقياً بسيطاً يتذبذب حول النقطة $x = o$ ، ما هو التفسير المناسب للنظام المعدَّل ؟ د) هل ينسجم هذا التفسير مع حسابات القيمة المميزة لطاقة هذا النظام ؟

14–10 تكون الدالات الموجية غير المضطربة لأجل المسألة (14–9) هي :

$$u_n = \frac{H_n(x) \exp(-x^2/2)}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}$$

أ) أوجد الحدود المتضمنة لـ α ، والتي تختلف بها الدالة المميزة Vn للنظام المعدَّل عن الدالة Un . ب) قارن هذا التقريب لأجل Vn مع سلسلة تايلور التي يُنشر بوساطتها الحل الدقيق عبر قوى α . ج) استخلص بهذه الطريقة العلاقة التكرارية لأجل Hn و H́n .

14-11 احسب القيمة التقريبية لطاقة الحالة P الأدنى بالنسبة لجسيم كتلته m ويتحرك عبر جهد من الشكل $A/\sqrt{r}$.

14-12 توضع ذرة هيدروجين في مجال كهرساكن شدته 10^3 فولت ساكن/سم = 3×10^5 فولت / سم ، وتتم إزالة هذا المجال فجأةً .

احسب احتمالية أن ينبعث عن هذه الذرة ، وبعد ذلك ، فوتون بطول موجةٍ يساوي طول موجة الخط الأول في سلسلة لايْمان $(n = 2 \rightarrow n = 1)$:

$$\psi_{100} = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{(32\pi a_0^5)^{1/2}} z \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

$e = 4.8 \times 10^{-10}$ كولوم ساكن $= 1.6 \times 10^{-19}$ كولوم

$a_0 = 0.53 \times 10^{-8}$ سم

$$\int_0^\infty x^n \exp(-x)\, dx = n!$$

14-13 يخضع متذبذب غير توافقي وحيد البعد لمعادلة الحركة الكلاسيكية ذات الشكل :

$$m\ddot{x} + kx + ax^3 = 0$$

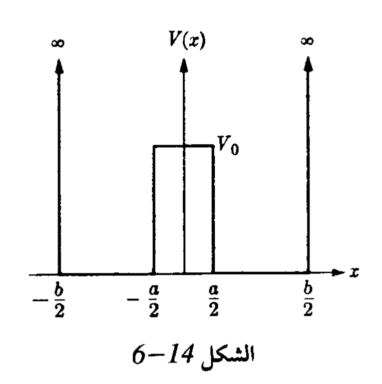
أ) احسب قيم الطاقة الممكنة بالنسبة له مستخدماً المرتبة الأولى من نظرية الاضطراب . ب) احسب الدالة المميزة الموافقة لحالة الطاقة الأدنى بالنسبة لهذا النظام .

14–14 متذبذب وحيد البعد على هيئة كتلة m معلقة بنابض ثابت نبضه K يقع في حالته الطاقية الأدنى . ويتم رفع النهاية العليا للنابض بشكل مفاجىء بمقدار d ؛ وبعد زمن قدره T تجري اعادته بسرعة الى الوضع الأصلي . أ) بفرض أن المرتبة الأولى من نظرية الاضطراب سارية المفعول ، احسب احتمالية أن يكون قد تم الانتقال الى الحالة المهيَّجة الأولى . ب) بيِّن أن هذا الانتقال ـ في المرتبة الأولى من النظرية ـ هو الانتقال الوحيد الذي يجري .

15–14 استخلص القيمة التقريبية للطاقة الأدنى بالنسبة لذرة الهيدروجين مُطبِّقاً التقنيات التغيُّرية على الدالة الموجية الخاصة بالحالة الدنيا لمتذبذب ثلاثي الأبعاد مأخوذةً على شكل دالة ذات ذيل :

$$\psi = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{3/4} \exp\left(-ar^2\right)$$

16–14 أ) احسب الطاقات الممكنة بالنسبة لحركة وحيدة البعد فقط تجري في البئر الكمونية المبيَّنة في الشكل (14–6) وتخضع للشرطين $2mE_0a^2 \ll \hbar^2$ و $2mV_0a^2 \ll \hbar^2$. ب) بيِّن أن المستويات الطاقية تظهر على شكل أزواج بالنسبة للنظام من جسيم تقع طاقاته ضمن نطاق تكون احتمالية الانتقال عبر



الشكل 14–6

الحاجز المركزي فيه صغيرة (انظر الفصل الثالث)، وأن كل زوج يتكون من حالات شفعية ووترية . ج) استخلص حالة تراكب الطاقة من أزواج كهذه ، إذا علمت أن الجسيم يوجد ، وعلى الأغلب ، في الجانب الأيسر تحديداً من البئر .

وتكون هذه الحالة مماثلة للحركة الكلاسيكية لجسيم طاقته $E<V_0$. تفحّص التبعية الزمنية لهذه الحالة ، وبين أن الزمن الذي يحتاجه الجسيم لبلوغ الجانب الأيمن من الحفرة هو من المرتبة نفسها للمقدار الذي يتم الحصول عليه انطلاقاً من الاعتبار شبه الكلاسيكي التالي :

لنفترض أن الجسيم كلاسيكي يتنقّل جيئةً وذهاباً على الجانب الأيسر من البئر مع وجود احتمالية بانتقاله عبر الحاجز ، وكان قد جرى حسابه بطريقة كماتية في الفصل الثالث . قارنْ هذا الحساب للتبعية الزمنية لاحتمالية شَغْل الجانب الأيمن من الصندوق مع حسابات ميكانيك الكم .

الفصل الخامس عشر

المفاعَلة مع مجال كهرمغنطيسي قوي

15-1 مؤثر هاملتون لجسيم في المجال الكهرمغنطيسي .

سوف ندرس في هذا الفصل المفاعلة بين جسيم مشحون ومجال كهرمغنطيسي خارجي المنشأ . وفي إطار المعالجة الشاملة ، يجب عدُّ المجال الكهرمغنطيسي نظاماً حركياً تتم معالجة احداثياته وزخمه وفقاً لشكلانية ميكانيك الكم(*) . وعندما تجري معالجة المجال على هذا النحو ، يتبينّ أنه يبدي الكثير من خواص الجسيمات كما ذُكِر سابقاً ، وهذه الكمّات الكهرمغنطيسية تسمى الفوتونات . فمسألة المفاعلة بين المجال والجسيم المشحون هي ، ومن حيث الجوهر ، مسألة ولادة الفوتونات وفنائها تحت تأثير المفاعلة مع الجسيم المشحون . ولكن ، وفي المجال الكهرمغنطيسي القوي بما فيه الكفاية ، تتحول تأثيرات ميكانيك الكم النوعية الى تأرجحات صغيرة تطرأ على الكميات الكبيرة التي تتحدد بطريقة كلاسيكية ؛ ومن الممكن توصيف تأثير المجال الكهرمغنطيسي في الجسيمات المشحونة ، كونه مفاعلةً بين تلك الجسيمات والمتغيرات التي تميز المجال الكهرمغنطيسي الخارجي . ويتم ضمن هذا الطراز من التوصيف تجاهل التأثير الذي تمارسه الجسيمات المشحونة على المجال الكهرمغنطيسي ، وعليه فإن توصيفاً كهذا غير قادر ، ومن الأساس ، على وصف عمليات الإشعاع الناجم عن الذرة . ولكنه قادر على وصف تأثير المجال في الجسيمات المشحونة . فمثلاً ، نستطيع تقدير فعل المجال الكهرمغنطيسي الذي يجعل الذرة تقفز من حالة طاقية الى أخرى .

وبهدف إدخال المفاعلة الكهرمغنطيسية ، وبشكل ملائم ، في معادلات الحركة للجسيم المشحون ، سنبدأ من دالة هاملتون الكلاسيكية للجسيم (راجع الفصل الخامس):

$$H = \frac{1}{2m}\left(p - \frac{q}{c}A\right)^2 + q\phi \qquad (15-1)$$

* انظر

(*)W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*, Oxford University Press, Oxford, 3rd ed., 1958.

حيث : p — الزخم القانوني ، وهو يرتبط بالزخم الخطي العادي mv عبر العلاقة التالية :

$$p = mv + \frac{q}{c} A \qquad (15-2)$$

ويمكن تعويض دالة هاملتون هذه في معادلة شرودينغر ، وذلك بمثابة مؤثر هاملتون :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (15-3)$$

وبما أننا نعامل المجالات على أنها مقادير خارجية المنشأ ، فإن المؤثرين $\vec{A}$ و ϕ في المعادلة (15−1) هما مجرد دالتين عاديتين تابعتين للموضع والزمن .

15−2 حركة الكترون حر في المجال المغنطيسي المنتظم .

سنقوم بدراسة المفاعلة بين الكترون حر ومجال مغنطيسي ساكن منتظم ، وذلك كمثال أول على المفاعلة بين الجسيم المشحون والمجال الكهرمغنطيسي ، ويمكن في هذه الحالة كتابة دالة هاملتون على الشكل التالي :

$$H = \frac{1}{2m}\left(P + \frac{e}{c} A\right)^2 \qquad (15-4)$$

حيت لايوجد كمون كهرساكن .

وتعطى شدة المجال المغنطيسي بالعلاقة :

$$\mathcal{B} = \nabla \times A \qquad (15-5)$$

بينما يُختزَل شرط لورنتز في المعادلة (5−20) الى :

$$\nabla \cdot A = 0 \qquad (15-6)$$

وبما أن :

$$[f(x), P_x] = i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \qquad (15-7)$$

فمن الواضح أن :

$$A \cdot P - P \cdot A = i\hbar\, \nabla \cdot A \qquad (15-8)$$

وتُبيِّن هذه المعادلة والمعادلة (6−15) معاً أن مؤثر الزخم والكمون المتَّجهي يتبادلان :

$$\mathbf{P} \cdot A = A \cdot \mathbf{P} \qquad (15-9)$$

واذا نشرنا المعادلة (4−15) واستخدمنا هذه المبادلة ، فإننا سنحصل على :

$$\mathrm{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{e}{mc} A \cdot \mathbf{P} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \qquad (15-10)$$

وعلاوة على ذلك ، ونظراً لأن الكمون المتَّجهي يمثل مجالاً مغنطيسياً موحداً ، فإنه يمكن كتابته على الشكل :

$$A = -\tfrac{1}{2} r \times \mathcal{B} \qquad (15-11)$$

ويمكن كتابة الحد الثاني في مؤثر هاملتون بمعزل عن العامل e/mc ، وذلك بالصيغة التالية :

$$A \cdot \mathbf{P} = -\tfrac{1}{2}(r \times \mathcal{B}) \cdot \mathbf{P} = \tfrac{1}{2}\mathcal{B} \cdot (r \times \mathbf{P}) = \tfrac{1}{2}\mathcal{B} \cdot \mathbf{L} \qquad (15-12)$$

لأن كلًّا من r و $\mathcal{B}$ يتبادلان ، وكذلك فإن :

$$A^2 = \tfrac{1}{4}|r \times \mathcal{B}|^2 = \tfrac{1}{4}[r^2\mathcal{B}^2 - (r \cdot \mathcal{B})^2] \qquad (15-13)$$

ولكي نبسط الترميز ، لنفترض أن المجال المغناطيسي المنتظم موجَّه باتجاه المركبة Z من المقدار B . ففي هذه الحالة يُختزل مؤثر هاملتون إلى :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m} \mathrm{P}^2 + \frac{e}{2mc} \mathcal{B}\mathrm{L}_z + \frac{e^2\mathcal{B}^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) \qquad (15-14)$$

من هذه المعادلة نرى أن المؤثر $\mathrm{L_z}$ يبادل مؤثر هاملتون وكلاهما يبادل المؤثر Pz . وبالتالي ، فإن المؤثرات الثلاثة H و$\mathrm{P_z}$ و$\mathrm{L_z}$ تبادل أحدها الآخر ، ومن الممكن اختيار الدالات الموجية ، بحيث تكون دالات مميزة مشتركة للمؤثرات الثلاثة كلها . (لنتذكر من المعادلة (2−15) أن الزخم لم يعد مجرد زخم حركي فقط (mv) ، والمركبة Lz من الزخم الزاوي تتضمن الآن أيضاً جزءاً يوافق الحد الناجم عن A في الزخم المعمم). وإن الطاقة التي يمثلها مؤثر هاملتون يمكن تقسيمها إلى ثلاثة أجزاء : الطاقة المرافقة للحركة في الاتجاه Z ، والحد المتضمن لـ Lz ، وفضلة الطاقة المرتبطة بالحركة في الاتجاهين x و y . وسوف نرمز إلى

هذا الجزء الأخير بالمؤثر H_0 :

$$H_0 = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \tfrac{1}{2}\left(\frac{e^2\mathcal{B}^2}{4mc^2}\right)(x^2 + y^2) \qquad (15-15)$$

نلاحظ أن هذا ، ببساطة ، هو مؤثر هاملتون للمتذبذب التوافقي البسيط ثنائي الأبعاد ، والذي تشكل طاقته مجموعة طاقتي المتذبذبين التوافقيين الخطيَّين . ويمكن كتابة الدالة الموجية ، والتي هي دالة مميزة للمؤثرات الثلاثة المتبادلة H_0 وL_z وP_z في آن واحد ، على الشكل التالي :

$$\psi = \psi_{nm_lp_z} \qquad (15-16)$$

فالدلائل الثلاثة هنا هي الأعداد الكمية التي تظهر في معادلات القيمة المميزة ، حيث :

$$\begin{aligned} H_0\psi_{nm_lp_z} &= (n+1)\hbar\omega\psi_{nm_lp_z}, \\ L_z\psi_{nm_lp_z} &= m_l\hbar\psi_{nm_lp_z}, \\ P_z\psi_{nm_lp_z} &= p_z\psi_{nm_lp_z} \end{aligned} \qquad (15-17)$$

وتعطى ω ، التي تظهر في أولى هذه المعادلات ، بالعلاقة :

$$\omega = +\frac{e\mathcal{B}}{2mc} \qquad (15-18)$$

والدالة الموجية في الحالة الدنيا للمتذبذب ثنائي الأبعاد هي دالة شفعية إزاء تعبير اشارتي الإحداثيين x و y :

$$\psi_{0m_lp_z}(x, y) = \psi_{0m_lp_z}(-x, -y) \qquad (15-19)$$

والحالة المهيَّجة الأولى ، حيث $n = 1$ ، هي دالة وترية إزاء تغيير الإشارة من قبل x و y كليهما . وواضح أن الدالات الموجية الشفعية تترافق مع الأعداد الكمية n الشفعية ، بينما تترافق الدالات الموجية الوترية مع الأعداد الكمية الوترية . وكذلك ، فإن القيم الشفعية لـ m_l في المعادلة (15–17) مترافقة مع الدالات الموجية الشفعية إزاء تغيير إشارتي x و y ، وتترافق القيم الوترية لـ m_l مع الدالات الموجية الوترية . لذلك ، فإن n و m_l يكونان إما شفعيَّين وإما وتريين في آن واحد . ونستطيع من النقاش الذي جرى أعلاه كتابة معادلة القيمة

المميزة للطاقة بالنسبة لمؤثر هاملتون الاجمالي كالآتي :

$$H\psi_{nm_lp_z} = \left[\frac{1}{2m} p_z^2 + (n+1)\hbar\omega + m_l\hbar\omega\right]\psi_{nm_lp_z} \qquad (15-20)$$

$$= \left[\frac{1}{2m} p_z^2 + (n + m_l + 1)\hbar\omega\right]\psi_{nm_lp_z}$$

وباستطاعتنا أيضاً استخدام مؤثرات المرقاة للحصول على الدالة الموجية نفسها (انظر المسألة (9−15). وبما أن m_l و n يكونان إما شفعيين كليهما وإما وتريين كليهما ، وبما أن الطاقة الاجمالية للالكترون في المجال المغنطيسي الموحد لا تستطيع أن تكون سالبة (لأن H هو مربع مؤثر هرميتي — انظر المعادلة (4 -15))، نجد أن :

$$n + m_l = 2r \geq 0 \qquad (15-21)$$

وعليه ، فإن :

$$n \geq -m_l \qquad (15-22)$$

ويمكن أن نكتب القيمة المميزة للطاقة الاجمالية على الشكل التالي :

$$E_{nm_lp_z} = (2r+1)\hbar\omega + \frac{1}{2m} p_z^2, \qquad r = 0, 1, 2 \ldots \qquad (15-23)$$

وتمثل الكمية p_z زخم الجسيم في الاتجاه z . وتتألف الطاقة الاجمالية للالكترون من الطاقة الحركية المرافقة للحركة على طول الاتجاه z ، والطاقة المرافقة للحركة في المستوى $x\,y$ كما هي معطاة عبر $(2r+1)\hbar\omega$. ونلاحظ من المعادلة (23 − 15) أن الحركة في الاتجاهين x و y تتميز بتأثير تأرجح نقطة الصفر المرتبطة بها كما في حالة المتذبذب التوافقي البسيط ، وأن الطاقة الأدنى للالكترون في المجال المغنطيسي المنتظم لا تساوي الصفر بل تساوي $\hbar\omega$. وهذه النتيجة مفاجأة صريحة ، إذ إن الالكترون ليس محصوراً ضمن منطقة صغيرة في الفراغ من قبل المجال المغنطيسي ، بل يستطيع أن يوجد في مكان ضمن حجم أكبر ، ولذا قد يتراءى لنا في البداية أنه لا يجب أن يؤدي مبدأ عدم التحديد إلى عدم تحديد في الزخم وفي الاضافة التي تطرأ على الطاقة الحركية للجسيم .

إن المؤثر في المعادلة(14−15) ليس مؤثر هاملتون الوحيد الذي يصف حركة

الالكترون في المجال المغنطيسي المنتظم ، إذ يمكن استخدام عدد لانهائي من الكمونات المتجهية $\vec{A}$ لتمثيل مجال مغنطيسي منتظم على طول الاتجاه z . وإن التقييد الوحيد الضروري ، ولكي تكون المعادلة(15-10)صالحة ، يكمن في تحقق المعادلتين (15-5) و(15-6). ومن السهولة بمكان رؤية أن أي كمون متجهي A مرتبط بالكمون المتجهي (15-11)، وذلك من خلال العلاقة التالية :

$$A' = A + \nabla f \qquad (15-24)$$

حيث : f — أية دالة سلمية قابلة للاشتقاق وتابعة للموضع $(f = f(x, y, z))$ وتلبي المعادلة :

$$\nabla^2 f = 0 \qquad (15-25)$$

وهو أيضاً (أي الكمون المتجهي A) يمثل المجال المغنطيسي المنتظم اسوة بـ A . (ويشكل التحويل الوارد في (24 - 15) حالة خاصة من التحويل **العياري** الذي يجري عبرْ تحويل الكمونين الكهرمغنطيسيَّين ، السلمي (ϕ) والمتجهي (A) ، بطريقة تُبقي المجالات الكهرمغطيسية دون تغيير . ولا يبدل مثل هذا التحويل شيئاً في الموقف الفيزيائي).

يمكن من الناحية الشكلية أن نبينّ ، وبالتعويض المباشر ، أنه إذا أُجري تحويل الكمون المتجهي بموجب المعادلة (15-24)، فإن الشكل الأصلي لمعادلة القيمة المميزة الطاقية يمكن استخلاصه فيما لو أُجري في الوقت ذاته تحويل الدالة الموجية :

$$\psi' = \psi \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right) \qquad (15-26)$$

لنأخذ مثالاً على الكمون المتجهي البديل ، هو :

$$A'_x = -\mathcal{B}y, \qquad A'_y = A'_z = 0 \qquad (15-27)$$

والذي نستطيع الحصول عليه في كل من المعادلتين (15-11)و (15-24) والدالة السلمية :

$$f = -\frac{\mathcal{B}}{2} xy \qquad (15-28)$$

وفي ظل اختيار كهذا للكمون المتجهي ، تكون معادلة القيمة المميزة للطاقة كالتالي :

$$\left[\frac{1}{2m}\left(P_x - \frac{e\mathcal{B}y}{c}\right)^2 + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m}\right]\psi = E\psi \qquad (15-29)$$

وكما في السابق ، فإن z هو إحداثي دوري ، والمؤثرات P_x و P_z و H تتبادل . وعندئذ ، يمكن اختيار الدالات الموجية لتكون دالات مميزة مشتركة لهذه المؤثرات ، ومثل هذه الدالات الموجية ستتخذ الشكل التالي :

$$\psi = \exp\left(\frac{ip_x x}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{ip_z z}{\hbar}\right)G(y) \qquad (15-30)$$

وتلبي الدالة $G(y)$ المعادلة التالية :

$$\left[\frac{P_y^2}{2m} - \frac{2ep_x\mathcal{B}y}{c} + \frac{e^2\mathcal{B}^2}{c^2}y^2\right]G(y) = E'G(y) \qquad (15-31)$$

حيث :

$$E' = E - \frac{p_z^2}{2m} - \frac{p_x^2}{2m} \qquad (15-32)$$

ويمكن تبسيط المعادلة (31 -15) بإجراء التعويض :

$$y_0 \equiv \frac{cp_x}{e\mathcal{B}} \qquad (15-33)$$

لتصبح كما يلي :

$$\left[\frac{P_y^2}{2m} + \frac{e^2\mathcal{B}^2}{2mc^2}(y - y_0)^2\right]G(y) = \left(E' + \frac{p_x^2}{2m}\right)G(y) = \left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right)G(y) \qquad (15-34)$$

حيث يمكن أن نتعرف على معادلة المتذبذب التوافقي البسيط ذي البعد الواحد ، والذي يملك تردداً (دائرياً) هو :

$$\omega_1 = \frac{e\mathcal{B}}{mc} \qquad (15-35)$$

(قارن المعادلة (34 -15) مع المعادلتين (55- 3) و (57- 3) . ويمكن كتابة الطاقة المرافقة لهذه الحركة حالاً ، وذلك بالاستفادة من النتائج التي حصلنا عليها قبلاً :

$$E' + \frac{p_x^2}{2m} = E - \frac{p_z^2}{2m} = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_1 \qquad (15-36)$$

أو :

$$E = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_1 + \frac{p_z^2}{2m} \qquad (15-37)$$

وذلك بلغة التردد (الدائري) والذي تم إدخال مفهومه أثناء مناقشة المسألة ذاتها بوجود الكمون البديل السابق في المعادلة (15-18)، ويمكن أن نكتب :

$$\omega = \frac{\omega_1}{2} \qquad (15-38)$$

و :

$$E = (2n + 1)\hbar\omega + \frac{p_z^2}{2m} \qquad (15-39)$$

وهذا مطابق للنتيجة التي استخلصناها سابقاً ، أي المعادلة (15-23)، وهو ما يجب أن يكون بطبيعة الحال ، ويتضح أن الطاقة المميزة E لا تتوقف على الزخم في الاتجاه x ، أي p_x ، ومع ذلك ، فإن هذا الزخم هو الآن ثابت حركة ويمكنه اكتساب أية قيمة ضمن النطاق المتصل $-\infty \leq p_x \leq +\infty$. وهكذا ، يوجد تفكك لا نهائي يمكن ربطه بكل حالة طاقية ، وذلك كما كان عليه الأمر في حالة الكمون البديل الذي نوقش سابقاً . ونستطيع أن نرى من المعادلة (15-20) وجود عدد لا نهائي من الامكانات لأجل كل قيمة من قيم الطاقة ، وذلك فيما يخص العددين الكميين m_l و n ، فكل ما يلزم هو أن يكون مجموعهما $n + m_l$ ثابتاً ، وبإمكان n عندئذ اكتساب أية قيمة صحيحة ضمن النطاق $n \geq 0$ ، بينما يستطيع m_l أن ينخذ أية قيمة صحيحة بحيث يكون $n \geq -m_l \geq -\infty$

يمكن تعديل مؤثر هاملتون في حالتي الكمون البديلتين بسهولة ليتضمن حداً يخص المفاعلة بين زخم البرم المغنطيسي لدى الجسيم والمجال الخارجي . فإذا أضفنا الحد التالي :

$$+\frac{e}{mc}\,\mathcal{B}\cdot\mathbf{S} = +\frac{e}{mc}\,\mathcal{B}\mathbf{S}_z \qquad (15-40)$$

تصبح طاقة الجسيم (الذي عددناه الكترونا) بنتيجة ذلك :

$$E_{nm_lp_z\pm} = (2r + 1 \pm \tfrac{1}{2})\hbar\omega + \frac{1}{2m}\,p_z^2 \qquad (15-41)$$

حيث تدل الاشارتان ± على التوجهين الممكنين بالنسبة لبرم الالكترون تجاه المجال المغنطيسي .

3-15 تأثير زيمان في المجال الضعيف :

إن تأثير زيمان يشعِّب الخط الطيفي إلى عدد من المركبات ، وذلك تحت تأثير المجال المغنطيسي الذي يؤثر في الذرة مصدر الانبعاث . وتكمن المسألة المترتبة هنا في حساب تأثير المجال المغنطيسي الخارجي على المستويات الطاقية للذرة . ويمكن كتابة مؤثر هاملتون للذرة وحيدة الالكترون ، أو للذرة وحيدة الكترون التكافؤ (كما في حالة المعدن القوي)، وذلك على منوال المعادلة (46−14):

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\,\mathrm{P}^2 + V(r) + \frac{1}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{dV}{dr}\,\mathbf{L}\cdot\mathrm{S} \qquad (15-42)$$

وفي وجود مجال مغنطيسي منتظم ، يؤول ذلك إلى :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{P} + \frac{e}{c}\,A\right)^2 + V(r) + f(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} + \frac{e}{mc}\,\mathcal{B}\cdot\mathbf{S} \qquad (15-43)$$

أما بالنسبة لشدة المجال المغنطيسي الذي نصادفه عادةً في المخبر ، فتتحقق المتراجحة التالية :

$$\left|\frac{e^2A^2}{mc^2}\right| \ll V(r) \qquad (15-44)$$

وذلك لأجل المناطق التي يتواجد فيها الالكترون دائماً تقريباً . وعليه ، يمكن أن نتجاهل مربع الكمون المتجهي مقارنةً مع الطاقة الكامنة للالكترون . فإذا تجاهلناه وأخذنا من جديد المجال المغنطيسي ليكون في اتجاه z ، نستطيع كتابة مؤثر هاملتون (43−15) على النحو التالي :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\,\mathrm{P}^2 + V(r) + f(r)\mathbf{L}\cdot\mathrm{S} + \frac{e\mathcal{B}}{2mc}\,(\mathrm{J}_z + \mathrm{S}_z) \qquad (15-45)$$

لأجل المستويات الطاقية ، وذلك ضمن تقريب المجال الضعيف هذا . فإذا استخدمنا نظرية الاضطراب ، يمكننا كتابة التغير في المستويات الطاقية بسبب تضمين الحد الأخير في المعادلة (45−15) وفقاً لتقريب المرتبة الأولى والمعادلة (18−15):

$$\Delta E = + \omega\langle J_z + S_z\rangle = m_j\hbar\omega + \omega\langle S_z\rangle \qquad (15-46)$$

وتتميز الدالة الموجية هنا بالأعداد الكمية n , l , j , m_j . ومن الضروري لأجل تقدير $\langle S_z\rangle$ أن نحسب ، وبشكل صريح ، تبعية هذه الدالة الموجية للبرم . ولهذه الغاية سوف نُدخل مؤثر المرقاة :

$$J_- = J_x - iJ_y \qquad (15-47)$$

ويعطينا استبدال L في المعادلة (9-59) ب J ما يلي :

$$J_-\psi_{l,j,m_j+1} = [(j - m_j)(j + m_j + 1)]^{1/2}\hbar\psi_{ljm_j} \qquad (15-48)$$

وبقصد التبسيط ، أهملنا هذا الدليل n ، وذلك لأنه عام بالنسبة لكل المستويات الطاقية قيد البحث . كذلك ، نجد من المعادلة (9-60) أن :

$$\psi_{ljm_j} = \left[\frac{(j + m_j)!}{(2j)!(j - m_j)!}\right]^{1/2} \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m_j} J_-^{j-m_j}\psi_{ljj} \qquad (15-49)$$

ومن الواضح أن أكبر قيمة ل m_j هي $l+1/2$ ، حيث الزخم الزاوي المداري للالكترون وزخم برمه الزاوي ، كلاهما يتخذ القيمة الأعظمية الممكنة لمركبتهما في الاتجاه z ، وهذا ما يمكن أن يحدث فقط عندما $j = l+1/2$.

وبالتالي ، فإن هذه الحالة الطاقية هي حالة ذاتية أيضاً L_z و S_z ويمكن تمييزها بالعددين الكميين $l = j-1/2$ و $m_j = j$. وطالما أن الدالة الموجية ، التي توفر ل j و m_j اكتساب قيمتيهما العظميين الممكنتين ، هي أيضاً دالة مميزة ل j و m_j اكتساب قيمتيهما العظميين الممكنتين ، هي أيضاً دالة مميزة ل L^2 و L_z و S_z ، فإنه يمكن كتابة الدالة الموجية على نحو صريح ، وذلك كما يلي :

$$\psi_{l,l+1/2,l+1/2} = Y_{ll}(\theta, \phi) R_+(r) \qquad (15-50)$$

يشير المؤشر (+) لدى الدالة الشعاعية إلى أن برم الالكترون هو في اتجاه z الموجب . ويمكن بوساطة مؤثر المرقاة توليد الدالات المميزة الأخرى كافة ذات القيمة نفسها لأجل j كما في المعادلة (15-49). وعلى وجه التخصيص ، تتخذ الدالة ، في حالة $m_j = j-1$ ، الشكل التالي :

$$\psi_{j-1/2,j,j-1} = \frac{1}{\hbar\sqrt{2j}} J_-\psi_{j-1/2,j,j} \qquad (15-51)$$

وهناك دالتان مميَّزتان اثنتان لهما هذه القيمة نفسها المعينة من m_j . ويمكن أن تكتب الدالة الثانية المعامدة للدالة الأولى (15-51)، على الشكل التالي :

$$\frac{1}{\sqrt{2l(2l+1)}}\,(L_- - 2lS_-)\psi_{j-1/2,j,j} \qquad (15-52)$$

(يمكن التأكد مباشرة من أن الدالتين (15-51) و (15-52) تعامد إحداهما الأخرى). ومن هنا ، لا تستطيع الدالة (15-52) أن تكون دالة مميزة في حالة القيمة الأعظمية لـ j ، بل يجب أن تكون دالة مميزة لحالة قيمة أصغر من j . وتحديداً لحالة $j=\ell-½$. وعندئذ ، يمكن أن تُتَّخذ هذه الدالة كدالة أساسية في سلسلة توافق كلَّ القيم الممكنة لـ m_j في ظل هذه القيمة المحددة لـ j . ويمكننا من خلال البدء ، إما بالدالة (15-50) أو بالدالة (15-52)، توليد جميع الدالات المميزة التي لها هذه القيمة نفسها المحددة من ℓ والعدد الكمي الاجمالي n :

$$\psi_{l,l+1/2,m_j} = \left[\frac{(l+\frac{1}{2}+m_j)!}{(2l+1)!(l+\frac{1}{2}-m_j)!}\right]^{1/2} \times\left(\frac{1}{\hbar}\right)^{l+1/2-m_j} J_-^{l+1/2-m_j}\psi_{l,l+1/2,l+1/2}, \qquad (15-53)$$

$$\psi_{l,l-1/2,m_j} = \left[\frac{(l-\frac{1}{2}+m_j)!}{(2l+1)!(l-\frac{1}{2}+m_j)!}\right]^{1/2} \times\left(\frac{1}{\hbar}\right)^{l-1/2-m_j} J_-^{l-1/2-m_j}(L_- - 2lS_-)\psi_{l,l+1/2,l+1/2}$$

يمكننا تبسيط مؤثرات المرقاة التي تظهر في هاتين النعادلتين ، بالاستفادة من

$$J_-^{l+1/2-m_j} = (L_- + S_-)^{l+1/2-m_j} = L_-^{l+1/2-m_j} + (l+\tfrac{1}{2}-m_j)L_-^{l-1/2-m_j}S_- \qquad (15-54)$$

علماً أن المؤثر S يظهر فقط في المرتبة الأولى . فتأثير هذا المؤثر هو إما أن « يطوي زخم البرم » أو أن يعطي صفراً ، وبالتالي ، فإن مربعه وجميع قواه العليا تساوي الصفر . ونحصل بالجمع الملائم بين المعادلات السابقة على :

$$\psi_{l,l+1/2,m_j} = \left(\frac{l+\frac{1}{2}+m_j}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,m_j-1/2}R_+ + \left(\frac{l+\frac{1}{2}-m_j}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,m_j+1/2}R_-, \quad (15-55)$$

$$\psi_{l,l-1/2,m_j} = \left(\frac{l+\frac{1}{2}-m_j}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,m_j-1/2}R_+ - \left(\frac{l+\frac{1}{2}+m_j}{2l+1}\right)^{1/2} Y_{l,m_j+1/2}R_-$$

تمثل هاتان المعادلتان نشراً للدالات الموجية الموسومة بالأعداد الكمية ℓ و M_j ، وذلك عبر الدالات الموجية الموسومة بالأعداد الكمية ℓ وm_ℓ و m_s ، وبهذا الشكل نكون قد قمنا بتحويل التمثيل من جملة دالات قاعدية إلى جملة أخرى .

تكون هذه الطريقة في التعبير عن الدالات الموجية ψ_{ljm_j} مفيدة ، بخاصة لأجل حساب $\langle S_z \rangle$ ، إذ إن الحدود التي يتضمنها التحليل المعطى في (15−55) هي — كلٌ بمفرده — دالات مميزة ل S_z ومتعامدة فيما بينها . وعليه ، فإن الحدود التصالبية في المعادلة الخاصة بحساب $\langle S_z \rangle$ ، تساوي الصفر ، وهذه القيمة المتوقعة تساوي :

$$\langle S_z \rangle_{j=l+1/2} = \frac{1}{2}\hbar\,\frac{l+\frac{1}{2}+m_j}{2l+1} - \frac{1}{2}\hbar\,\frac{l+\frac{1}{2}-m_j}{2l+1} = \frac{m_j\hbar}{2l+1} \quad (15-56)$$

$$\langle S_z \rangle_{j=l-1/2} = \frac{1}{2}\hbar\,\frac{l+\frac{1}{2}-m_j}{2l+1} - \frac{1}{2}\hbar\,\frac{l+\frac{1}{2}+m_j}{2l+1} = -\frac{m_j\hbar}{2l+1} \quad (15-57)$$

وبتعويض هاتين النتيجتين في المعادلة (15−46) نجد أن :

$$\Delta E_{ljm_j} = m_j\hbar\omega\left(\frac{2j+1}{2l+1}\right) \quad (15-58)$$

وهذا هو التغيير الذي يطرأ على الطاقة في مستوى طاقي معين ، وذلك تحت

تأثير المجال المغنطيسي الخارجي .

تملك هذه النتيجة تفسيراً فيزيائياً بسيطاً . ويجب أن نلاحظ أن كل مستوى طاقي يتميز بـ m_j معيناً تتغير طاقته بمقدار يتناسب طرداً مع m_j ، وبكلمات أخرى ، فإن كل المستويات الطاقية الموافقة لـ ز معيناً (وهو يمثل التوجهات الممكنة للزخم الزاوي الاجمالي بالنسبة للمجال المغنطيسي) هي مستويات متساوية من حيث الطاقة عندما يساوي المجال المغنطيسي الصفر ، ولكن كل مستوى منها تتغير طاقته حين يُطبَّق المجال المغنطيسي ، وذلك بمقدار يتناسب طرداً مع مركّبة الزخم الزاوي الاجمالي في اتجاه المجال المغنطيسي . وهذه بالضبط هي النتيجة التي يجب على المرء أن يتوقعها إذا ما تصورنا الزخم الزاوي للذرة مزوداً بذروة دوارة تملك عزماً مغنطيسياً محدداً . فالمفاعلة بين عزم مغنطيسي كهذا والمجال المغنطيسي تتناسب طرداً مع مركبة الزخم الزاوي في اتجاه المجال مؤدية إلى التشعُّب المتساوي الذي توصلنا إليه .

ينشأ العزم المغنطيسي المرتبط بمتجه الزخم الزاوي J عن مساهمات الحركة المدارية للالكترون ، والتي يمكن عدها تياراً دائرياً ، عن برم الالكترون . ويتم جمع هاتين المساهمتين متجهياً ، وذلك لأن الزخمين الزاويين الموافقين لهما يُجمعان متجهياً أيضاً .

15–4 العامل g .

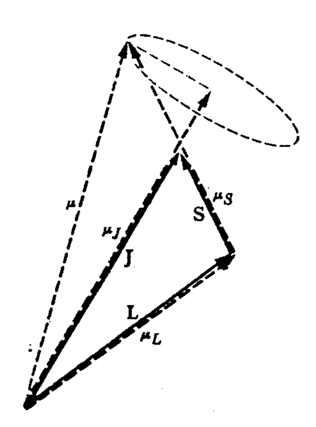
إحدى الكميات الهامة أثناء تحليل الطيف هي نسبة العزم المغنطيسي إلى الزخم الزاوي المرافق للذرة . وتعرف هذه النسبة باسم **النسبية الدوامية المغنطيسية** ، والتي يمكن كتابتها على شكل $g\,(e/2mc)$ حيث إن $/g/$ يسمى العامل g ، وهو عدد بلا قياس .

يختلف العامل g لأجل زخم البرم عنه لأجل الزخم الزاوي المداري . وبالتالي ، فإن اتجاه العزم المغنطيسي للذرة ، ووفقاً للنموذج المتجهي لها ، يختلف عن اتجاه الزخم الزاوي . وبإمكان المرء أن يتصور برم الكترون وزخمه الزاوي المداري على أن كلًا منهما يبادر بسرعة حول الزخم الزاوي الاجمالي للذرة ، مما يؤدي إلى مبادرة العزم المغنطيسي حول اتجاه الزخم الزاوي الاجمالي . ويمكن تصور هذه المبادرة السريعة على أنها تدفع كلَّ المركبات نحو القيمة المتوسطة باستثناء المركبة الموجهة في اتجاه الزخم الزاوي الاجمالي . وهي بذلك تؤدي إلى عزم مغنطيسي فعال بالنسبة للذرة

موجّه باتجاه الزخم الزاوي الاجمالي . ومن ناحية أخرى ، فإن الطريقة المتجهية المعقدة ، والتي يتم بها إضافة العزم المغنطيسي ، تؤدي إلى عامل g يقع بين العامل المماثل الخاص بالحركة المدارية وذلك الخاص بزخم البرم الزاوي . وإن الحد الواقع بين قوسين في المعادلة (58–15) هو عامل g ، وبالتحديد :

$$g = \frac{2j+1}{2l+1} \tag{15-59}$$

ومن الواضح أن هذا المقدار يساوي اثنين عندما ℓ تساوي الصفر، وذلك لأن $j = S = 1/2$. أما لأجل القيم الكبيرة من ℓ، فيصبح عامل g هذا مساوياً الواحد . وإن الشكل (15–1) هو مخطط متجهي يبين كيف أن الزخمين الزاويين يندغمان ليسفرا عن زخم زاوي اجمالي ، وكيف أن العزمين المغنطيسيين يندغمان متجهياً لينتج عن ذلك المركبة الصحيحة للعزم المغنطيسي في اتجاه محور الزخم الزاوي الاجمالي ، ولنحصل بذلك على العامل g كما في المعادلة (59–15).



الشكل 15-1 نموذج متجهي لجمع الزخمين الزاويين يبين عملية الجمع الموافقة للعزمين المغنطيسيين المرافقين لهما. وتمثل المتجهات المتقطعة العزوم المغنطيسية، بينما تمثل المتجهات السوداء الزخوم الزاوية، ويمكن استخلاص العامل g لأجل النظام الإجمالي من هذا النموذج.

15–5 تأثير زيمان في المجال القوي .

إن التغيرات الطاقية التي تعطى بالمعادلة (58–15) صحيحة فقط عندما يكون المجال ضعيفاً بما فيه الكفاية ، فالتغير في الطاقة يجب أن يكون صغيراً بالمقارنة مع

تشعُّب البنية الدقيقة بين الحالتين $j=\ell,½$ و$j=\ell-½$.· أما الحالة الخاصة الأخرى ، والتي تثير الاهتمام ، فهي حالة النهاية المتمثلة بالمجال القوي ، حيث يكون المجال المغنطيسي من القوة بمكان يجعله أكبر من المجال المغنطيسي الداخلي الذي يؤثر في الالكترون . وفي هذه الحالة يجري النظر إلى الحد البرمي — المداري من المعادلة (15-45) على أنه حد اضطرابي ، بينما يؤخذ حد زيمان بمثابة جزء من مؤثر هاملتون غير المضطرب . ومن المؤاتي الآن كتابة مؤثر هاملتون على الشكل التالي :

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + V(r) + \frac{e\mathcal{B}}{2mc} (L_z + 2S_z) + f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \qquad (15-60)$$

تشكل الحدود الثلاثة الأولى مؤثر هاملتون غير المضطرب . وتبادل جميع هذه الحدود والمؤثرات Lz وSz ، ولهذا فإن الدالات الموجية لمؤثر هاملتون غير المضطرب يمكن أن تؤخذ بحيث تكون دالات مميزة مشتركة للمؤثرات L^2 , Lz, Sz وذات أعداد كمية هي l, me, ms . ويمكن الآن كتابة طاقة الذرة في الحالة الموسومة بالأعداد الكمية ℓ و$m\ell$ وm_s و n ، وذلك على النحو التالي :

$$E_{nlm_lm_s} = E_n + \hbar\omega(m_l + 2m_s) + \langle f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}\rangle \qquad (15-61)$$

ويمثل الحد الأخير مساهمة من الاضطراب البرمي المداري على شكل القيمة المتوقعة لهذا المؤثر . وطالما أن القيمتين المتوسطتين L_x وL_y تساويان صفراً في حالة تحديد L_z ، فإنه يمكن تبسيط المساهمة الناجمة عن الحد الاضطرابي ، حيث :

$$\langle f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}\rangle = \langle f(r)L_zS_z\rangle = \langle f(r)\rangle m_l m_s \hbar^2 \qquad (15-62)$$

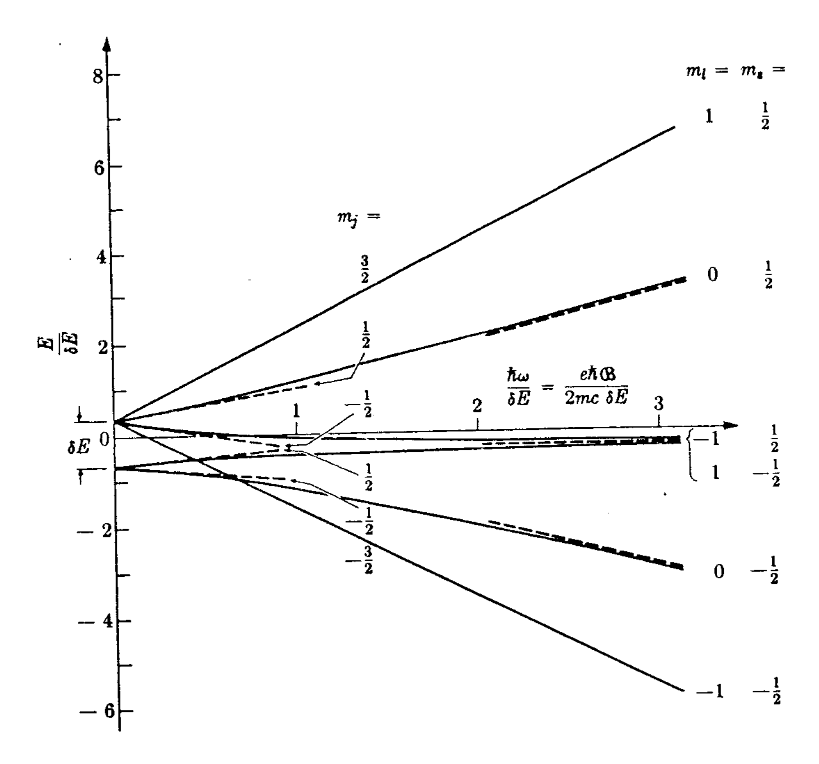
ويمكن التعبير عن هذه المساهمة في الطاقة بلغة تشعب البنية الدقيقة δE ، والذي يطرأ على المستوى الطاقي في ظل انعدام المجال . ونجد باستخدام المعادلة (9-71) أن هذا التشعب في ظل انعدام المجال المغنطيسي الخارجي هو :

$$\begin{aligned} \delta E \equiv E_{n,l,j=l+1/2} - E_{n,l,j=l-1/2} &= \langle f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}\rangle \\ &= \langle f(r)\rangle \tfrac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\, \hbar^2 \Big|_{j=l-1/2}^{j=l+1/2} \\ &= \langle f(r)\rangle (l + \tfrac{1}{2})\hbar^2 \end{aligned} \qquad (15-63)$$

ولأجل حالات الزخم الزاوي المختلفة ، وفي النهاية المتمثلة بالمجال القوي ، تكون

الطاقة التي يعبر عنها بهذه الطريقة مساويةً ما يلي :

$$E_{nljm_j} = E_n + \hbar\omega(m_l + 2m_s) + \delta E \frac{m_l m_s}{l + \frac{1}{2}} \tag{15-64}$$



الشكل 15-2. تأثير زيمان بالنسبة لذرة معدن قلوي في حالةP. وقد رُسمت الخطوط انطلاقاً من التعبير الصالح لأجل كل قيم المجال المغنطيسي. وكذلك بيّنا، وعلى شكل خطوط متقطعة، تشعّبات زيمان في «المجال الضعيف» و«المجال الضعيف» كنهايتين، وذلك وفقاً للحسابات التي وردت في النص بوساطة نظريةالاضطراب.

وتنتج المعادلة الموافقة ، والتي تصلح للنهاية ا لمتمثلة بالمجال الضعيف ، عن المعادلات (15−45) و(15−58) و(15−63)و(9−71):

$$E_{nljm_j} = E_n + \delta E\left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{2l+1}\right] + \hbar\omega m_j \left(\frac{2j+1}{2l+1}\right) \tag{15-65}$$

وهذان التعبيران مرسومان على الشكل (15−2) بوساطة خطوط متقطعة على شكل دالات تابعة لشدة المجال المغنطيسي في حالة $l = 1$. وقد رسمنا الخطوط بالأعداد الكمية الصالحة في حالة كل من النهايتين المتمثلتين بالمجال القوي والمجال الضعيف ، بالترتيب .

ويجب أن نلاحظ أن الطاقات في منطقة المجالات الضعيفة تتفرع من نقطة واحدة ، حيث المجال المغنطيسي يساوي الصفر ، وأن الخطوط متساوية التباعد لأجل قيمة معطاة لـ j . والمعادلتان (15−64) و(15−65)تصلحان فقط في النهايتين المتمثلتين بالمجال القوي جداً والمجال الضعيف جداً بالترتيب في حين رسمت الخطوط السوداء على الشكل (15−2) انطلاقاً من تعبير دقيق جيد بالنسبة لكل المجالات المغنطيسية . وبما أن الشكل قد رسم لأجل $l = 1$ ، فإن هذه المستويات الطاقية تمثل سلوك مستويات الطاقة لدى معدن قلوي ، مثل الصوديوم في الحالة P .

15−6 المفاعلة بين الالكترون الذري وموجة كهرمغنطيسية مستوية .

سوف نحسب في هذه الفقرة مقدار امتصاص الذرة للطاقة من الموجة الكهرمغنطيسية التي تسقط عليها ، إضافةً إلى مقدار الانبعاث المحثّ الذي يتم إذا حدث للذرة أن تكون في حالة مهيجة . ويجب أن نلاحظ أنه ، وبما ينسجم مع التقريب الذي يجري استخدامه ، يتم تجاهل الانبعاث الطبيعي (التلقائي) النابع من الذرة . ويساوي مقدار شدة المجال المغنطيسي ، وبالنسبة للموجة المستوية في الفراغ الحر ، مقدار شدة المجال الكهربائي (بواحدات قياس cgs)، ومن هنا ، يمكننا تقدير مرتبة طاقات المفاعلة .

إن أول ما سنقوم بحسابه هو طاقة المفاعلة بين الالكترون والمجال الكهربائي الناجم عن الشحنة الكهربائية . ولهذه الطاقة مرتبة المقدار $ea_0\mathcal{E}$ حيث : a_0 قياس نصف قطر الذرة . ومن جهة أخرى ، فإن المفاعلة الخاصة بثنائي الأقطاب المغنطيسي تتمتع بطاقة لها مرتبة $(e\hbar/mc)\mathcal{B}$ ، وهذا ما يمثل طاقة المفاعلة بين العزم الخاص بثنائي الأقطاب المغنطيسي للألكترون والمجال المغنطيسي . إذا أخذنا a_0 مساوياًلنصف قطر بـور لدى ذرة الهيدروجين ، سيكون :

$$a_0 = \frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{1}{\alpha^2} = \frac{\hbar}{mc} \cdot \frac{1}{\alpha} \qquad (15-66)$$

حيث : α ثابت البنية الدقيقة والذي يعطى بالعلاقة :

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \qquad (15-67)$$

وبمقارنة مقداري المفاعلين الكهربائية والمغنطيسية ، نرى أن طاقة المفاعلة المغنطيسية تساوي نحو $\frac{1}{137}$ من طاقة المفاعلة الكهربائية ، ولذلك يمكن تجاهلها في سعينا للحصول على تقريب جيد ، مما يعطي المعادلة التالية :

$$H' = +\frac{e}{mc} A \cdot P \qquad (15-68)$$

بمثابة طاقة المفاعلة الوحيدة التي يتوجب دراستها .

ويمكن لأجل الموجة المستوية الافتراض أن الجهد المتجهي هو :

$$A = \{A_0 \exp[i(k \cdot r - \omega t)]\}_{\text{real part}} \qquad (15-69)$$

وعند اختيارنا لعيار لورنتز ، وجعل الكمون السلمي ϕ مساوياً الصفر ، فإن مستوى استقطاب الموجة يكون معامداً لاتجاه انتشارها ، وعليه فإن :

$$A_0 \cdot k = 0 \qquad (15-70)$$

وكذلك فإن تباعد الكمون المتجهي يساوي الصفر :

$$\operatorname{div} A = 0 \qquad (15-71)$$

من الممكن بالنسبة للموجة الكهرمغنطيسية المستوية التي تملك طول موجة أكبر بالمقارنة مع قطر الذرة ، إدخال تبسيط لاحق يعرف باسم **تقريب ثنائي الأقطاب** . وفي هذه الحالة يكون $k \cdot r \ll 1$ لأجل قيم r كافةً ، حيث يستطيع الالكترون أن يتواجد .

ولهذا ، يمكننا استبدال الحد $\exp(ik \cdot r)$ في المعادلة (15−69) بالواحد . وإذا جعلنا مركز الذرة في النقطة $r = 0$ ، فإن طاقة المفاعلة (15−68) يمكن تقريبها على النحو التالي :

$$H' = +\frac{e}{mc} A_0 \cdot P \cos \omega t \qquad (15-72)$$

حيث وضعنا في حسابنا جزء المفاعلة المرتبط **بثنائي الأقطاب الكهربائي** . وهذا التقريب مكافىء للافتراض أن المجال الكهرمغنطيسي موحد ضمن منطقة كبيرة ، وذلك بالمقارنة مع قياس الذرة .

تكمن المسألة ، التي سننظر فيها الآن ، في حساب انتقالات الذرة بين الحالات الطاقية ، وذلك تحت تأثير المفاعلة مع الموجة الكهرمغنطيسية (15−72) . وسوف نطبّق نظرية الاضطراب التابع زمنياً ونستخدم ، وبشكل مباشر ، التعبير الخاص بنشر المعاملات C_j ، وذلك كما عرض في الفصل الرابع عشر . وبفرض أن شرط الرنين :

$$\omega_{j0} \approx \omega \qquad (15-73)$$

يتحقق ، وبعد إهمال الحدود الصغيرة ، نحصل على :

$$c_j(t) = -\frac{ie}{2mc\hbar} A_0 \cdot (j|\mathbf{P}|0) \exp\left[\tfrac{1}{2}i(\omega_{j0}-\omega)t\right] \frac{\sin \frac{1}{2}(\omega_{j0}-\omega)t}{\frac{1}{2}(\omega_{j0}-\omega)} \qquad (15-74)$$

وبقصد تبسيط الترميز ، سنفترض أن اتجاه استقطاب الموجة الكهرمغنطيسية هو اتجاه Z الموجب ، ونحصل على احتمالية أن توجد الذرة في الحالة j في لحظة الزمن t :

$$|c_j(t)|^2 = \frac{e^2}{4m^2c^2\hbar^2} A_0^2 |(j|P_z|0)|^2 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{j0}-\omega)t}{\frac{1}{4}(\omega_{j0}-\omega)^2} \qquad (15-75)$$

نلاحظ أن هذه النتيجة تعني أن الذرة تكون في الحالة 0 حينما $t = 0$ ، أي اللحظة التي يمكن أن نتخيل في « التشغيل » المفاجىء للإشعاع الكهرمغنطيسي . وإن احتمالية الوجود في الحالة j في زمن متأخر t هي دالة زمنية ذات تذبذب جيبي ، وفي الواقع العملي ، هناك ـ عادةً ـ بعض آليات الاخماد التي توقف هذا التذبذب بين الحالات الطاقية .

إن أحد الأمثلة على مثل هذه الآليات هو الإخماد بالتصادم ، حيث أن التصادمات مع الذرات الأخرى تشوّش الذرة بطريقة تؤدي إلى تغيرات طورية عشوائية في مختلف معاملات النشر (15−54) C_k . ونتيجة لمثل هذه التغيرات الطوريّة العشوائية . يصبح سلوك الذرة ـ وبشكل وسطي ـ كما لو أنها توجد في أية واحدة من عدة حالات طاقية (نقية)، والتي تعطى احتمالياتها عبر مربعات C_k المعنية . وهكذا ، فإن كل ما يلزم هو حساب الاحتمالية الوسطية لحدوث الانتقال بين الحالة 0 والحالة j خلال زمن التصادم الأول . ولأجل انجاز ذلك ، لابد أولاً من الحصول على دالة توزيع التصادمات . وإن الذرة ، التي تجري مراقبتها في لحظة $t=0$ سوف تتعرض أخيراً للتصادم في زمن لاحق ما (t). واحتمالية أن يحدث التصادم

في زمن معين t ـ وبعد المراقبة الابتدائية ـ منسوبةً إلى واحدة الزمن (dw/dt) (أي أن يحدث تصادم لم يقع قبلاً في الفاصل ما بين 0 = t و t = t)، تساوي :

$$\frac{dW}{dt} = \gamma \exp(-\gamma t) \qquad (15-76)$$

ويمكن استخلاص هذه المعادلة من خلال تقسيم الفاصل الزمني ما بين 0= t و t = t إلى مقاطع لا متناهية في الصغر dt وضرب احتمالات عدم تعرض الذرة للتصادم خلال كل مقطع ببعضها بعضاً . وإذا كانت المعادلة (76-15) تمثل احتمالية حدوث التصادم في لحظة t منسوبة إلى واحدة الزمن ، فإن احتمالية الانتقال الوسطية ، وضمن الفاصل الزمني من الصفر إلى اللانهاية ، تساوي :

$$\overline{W} = \int_0^\infty |c_j(t)|^2 \gamma \exp(-\gamma t)\, dt \qquad (15-77)$$

وهذه هي الاحتمالية الوسطية لحصول الانتقال من الحالة 0 إلى الحالة j في زمن التصادم الأول بعد لحظة 0 = t والتكامل الذي يجب تقديره هو :

$$\int_0^\infty \gamma \exp(-\gamma t) \sin^2 \tfrac{1}{2}\alpha t\, dt = \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{\gamma^2 + \alpha^2} \qquad (15-78)$$

وبالاستفادة من هذه النتيجة ، بوسع المرء أن يستخلص احتمالية الانتقال منسوبةً إلى التصادم الواحد :

$$\overline{W} = \int_0^\infty |c_j(t)|^2 \gamma \exp(-\gamma t)\, dt = \frac{e^2 A_0^2}{4m^2c^2\hbar^2} |(j|P_z|0)|^2 \frac{2}{(\omega_{j0} - \omega)^2 + \gamma^2} \qquad (15-79)$$

ويجب أن نلاحظ من هذه المعادلة أن احتمالية نقل الذرة ، التي تقع في البداية في الحالة 0 ، إلى الحالة j تساوي بالضبط احتمالية نقل الذرة ، التي كانت تقع بدايةً في الحالة j إلى الحالة 0 ، ذلك لأن المعادلة :

$$|(0|P_z|j)|^2 = |(j|P_z|0)|^2 \qquad (15-80)$$

يجب أن تتحقق . وتعطينا المعادلة (79-15) احتمالية نقل الذرة من حالة إلى أخرى منسوبةً إلى التصادم الواحد ، ومن هنا نستطيع الحصول بسهولة على احتمالية الانتقال في الثانية الواحدة ما بين حالة طاقية وأخرى . ونحن ننجز ذلك عبر الضرب بالعدد

الوسطي للتصادمات في الثانية ، وهو ـ ببساطة ـ يساوي γ . وبمعرفتنا لاحتمالية حدوث الانتقال في الثانية الواحدة ما بين حالة وأخرى ، نستطيع أن نكتب مباشرة الطاقة التي يمتصها كل ثانية غاز يتضمن ذرات ، وذلك وفقاً لعددي الانشغال n_j وn_0 ، وتقع في الحالتين j و0 بالترتيب . فمقدار امتصاص الطاقة من قبل الغاز يساوي :

$$U = (n_0 - n_j)\hbar\omega \frac{e^2 A_0^2}{4m^2c^2\hbar^2} |(j|P_z|0)|^2 \frac{2\gamma}{(\omega_{j0} - \omega)^2 + \gamma^2} \qquad (15-81)$$

ومن المرغوب به أحياناً التعبير عن مقدار امتصاص الذرة (والتي تقع بدايةً في الحالة 0) للطاقة من الموجة الكهرمغنطيسية بلغة المقطع العرضي للتصادم ، وهو ما يمثل مساحة المقطع العرضي التي تكشفها الذرة للفوتونات السلقطة عليها ، ويساوي الطاقة المتوسطة التي تمتصها في الثانية الواحدة ذرة من الحالة 0 مقسومة على تدفق الطاقة للموجة الكهرمغنطيسية خلال الثانية الواحدة عبر سنتمتر مربع واحد . ويمكن عدّ هذه النسبة ، والتي لها قياس المساحة ، بمثابة مساحة المقطع العرضي الفعلية للذرة σ . ويكون تدفق الطاقة في الموجة المستوية هو :

$$S = \frac{\varepsilon^2}{8\pi} c = \frac{\omega^2 A_0^2}{8\pi c} \qquad (15-82)$$

ولذا ، فإن :

$$\sigma = \frac{\hbar\omega(e^2A_0^2/4m^2c^2\hbar^2)|(j|P_z|0)|^2\{2\gamma/[(\omega_{j0} - \omega)^2 + \gamma^2]\}}{\omega^2A_0^2/8\pi c} \qquad (15-83)$$

$$= 2\pi \frac{e^2}{\hbar c} \frac{|(j|P_z|0)|^2}{m^2\omega^2} \frac{2\gamma\omega}{(\omega_{j0} - \omega)^2 + \gamma^2}$$

وبوسعنا كتابة عنصر المصفوفة على الشكل التالي :

$$(j|P_z|0) = m \frac{i}{\hbar} (j|[H, z]|0) = im\omega_{j0}(j|z|0) \qquad (15-84)$$

وعندئذ يكون :

$$\sigma = 2\pi \frac{e^2}{\hbar c} |(j|z|0)|^2 \left(\frac{\omega_{j0}}{\omega}\right) \frac{2\gamma\omega_{j0}}{(\omega_{j0} - \omega)^2 + \gamma^2} \qquad (15-85)$$

وعليه ، فإن المقطع العرضي في حالة الرنين يساوي :

$$\sigma = 4\pi \frac{e^2}{\hbar c} |(j|z|0)|^2 \frac{\omega_{j0}}{\gamma} \qquad (15-86)$$

وبما أن العنصر المصفوفي $|(j|z|0)|$ وأثناء الانتقال القوي ، له مقدار من مرتبة قطر الذرة ، فإن الكمية السابقة ستكون من مرتبة « مساحة » الذرة مضروبة بالعامل $\alpha(\omega_{j0}/\gamma)$.

أحياناً يمكن تقدير العنصر المصفوفي انطلاقاً من قوانين الجمع المعنية :

$$\sum_j \omega_{j0}|(j|z|0)|^2 = \frac{\hbar}{2m} \qquad (15-87)$$

كذلك :

$$\sum_j |(j|z|0)|^2 = (0|z^2|0) = \langle z^2 \rangle_0 \qquad (15-88)$$

ويمكن استخلاص المعادلة (87−15) بسهولة إذا حسبنا أولاً المبادل بين Z ومؤثر هاملتون ، ثم شكّلنا المبادل بين Z وذلك المبادل ، مما يسفر عن :

$$2zHz - Hz^2 - z^2H = \frac{\hbar^2}{m} \qquad (15-89)$$

وتنتج المعادلة (87−15) عندئذ باشتقاق العنصر المصفوفي (0,0)من هذه المعادلة عبر تمثيل تكون مصفوفة H فيه قطرية .

أما المعادلة (88−15) فتنتج وعلى نحو بسيط من تطبيق قاعدة ضرب المصفوفات . فإذا كان 0 يشير إلى الحالة الدنيا ، فتكون جميع حدود الجمع في (87−15) موجبة ، ونحصل على المتراجحتين :

$$\omega_{j0}|(j|z|0)|^2 \le \frac{\hbar}{2m}, \qquad |(j|z|0)|^2 \le \langle z^2 \rangle_0 \qquad (15-90)$$

يطلق على التعبير $|(j|z|0)|^2 \; (2m\,\omega_{j0}/\hbar)$ اسم **شدة تذبذب** الانتقال ، ويتناسب المقطع العرضي الأعظمي طرداً مع شدة التذبذب . وتؤكد المعادلة (87−15)أن مجموع شدة التذبذب لسائر الانتقالات إلى مستوى طاقي معين يساوي الواحد . ومن المثير للاهتمام أن نلاحظ أن شدة التذبذب للخطين الصفراوين D لدى الصوديوم تساوي 0,976 ، والمتراجحة الأولى في (90−15) قريبة جداً من

المساواة . وعندما تساوي شدة التذبذب الواحد ، يمكن كتابة المقطع العرضي في الرنين على الشكل :

$$\sigma = 2\pi \frac{e^2}{\gamma mc} \qquad (15-91)$$

وهذا هو المقطع العرضي لامتصاص الاشعاع من قبل المتذبذب الكلاسيكي ، ومن هنا أصل المصطلح « شدة التذبذب ».

تفيد المعادلة (15−91) بأن المقطع العرضي لانهائي حين يكون الزمن بين التصادمات لانهائياً . ولكن تقريب المجال القوي يكون في هذه الحالة غير مطابق . ولابد من إدخال التأثير الناجم عن الاشعاع التلقائي وعن إخماد الاشعاع الموافق . وإذا أخذ هذان التأثيران في الحساب سنجد أن σ في الرنين سيكون فقط من مرتبة λ^2 .

وإذا كان الانشغال في الحالة j ، وبالنسبة للحالة 0 ، يتحدد بوساطة عامل بولتزمان (انظر الفصل 18):

$$\frac{n_0}{n_j} = \exp\left[\frac{-(E_0 - E_j)}{kT}\right] \qquad (15-92)$$

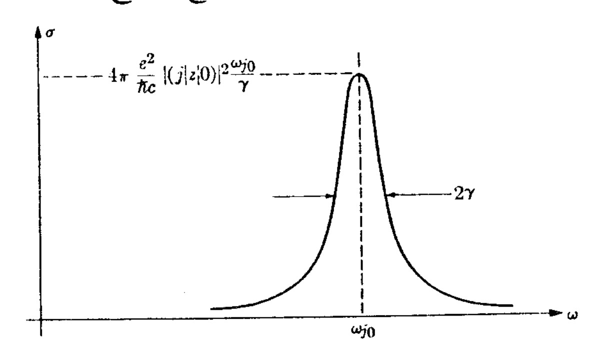
فإن معامل الامتصاص من قبل الغاز يمكن أن يكتب على الشكل التالي :

$$\Gamma = (n_0 + n_j)\,\frac{1 - \exp\left(-\hbar\omega_{j0}/kT\right)}{1 + \exp\left(-\hbar\omega_{j0}/kT\right)} \cdot \hbar\omega\sigma \qquad (15-93)$$

حيث يمثل n_0 وn_j عدد الذرات في الحالتين 0وj ضمن عامود غازيّ مقطعه العرضي سنتمتر مربع واحد ، أما Γ فمعامل الامتصاص ، أي ذلك الجزء من الاشعاع الذي يسقط على الغاز الذي يمتصه . ويلاحظ من المعادلة (15−83) أن الامتصاص الأعظمي يحدث في الرنين ، أي حين يكون تردد الإشعاع الساقط مساوياً التردد المرافق لفرق الطاقة بين الحالتين الطاقيتين . ونلاحظ في هذه الحالة أنه كلما كان γ أصغر كان المقطع العرضي للامتصاص أكبر ، فإنه حين يكون الغاز في الرنين ، يكون الامتصاص أكبر كلما كانت التصادمات ذات تردد أقل . ومن ناحية أخرى ، وبالنسبة للتصادمات البعيدة عن الرنين بأكثر من γ ، يزداد الامتصاص مع ازدياد قيم γ . ويمكن الحصول على المخطط البياني للامتصاص من خلال رسم المقطع العرضي للامتصاص كدالة تابعة للتردد ،وهذا ما فعلناه على الشكل (15−3) .

ويعرف المخطط البياني للامتصاص المعطى بالمعادلة (15-83) تحت اسم نموذج **منحني لورنتز** .

وكما أشرنا أعلاه ، فإن حساب الامتصاص قد جرى فقط لأجل النهاية المتمثلة بالمجال القوي ، ولكن التعبير الذي حصلنا عليه هو في الواقع صحيح أيضاً بالنسبة



الشكل *15 -3* . **المقطع العرضي للامتصاص الذري ، كدالة تابعة للتردد ، في حالة تباعد التصادمات . خط الامتصاص هذا يشبه خط لورنتز . .**

للمجالات الكهرمغنطيسية الضعيفة التي تسقط على الذرة شريطة أن يكون الزمن ما بين التصادمات قصيراً ، وذلك بالمقارنة مع الزمن الطبيعي الذي تحتاجه الذرة لإشعاع الفوتون تلقائياً بالقفز من الحالات j إلى الحالة 0 . وإذا لم يكن الزمن قصيراً نسبياً ، فإنه لابد من تعديل المعادلة (15-83) كما ورد سابقاً ، ذلك بإضافة حد آخر على γ^2 هو $\gamma^2 r$ والذي يمثل الإخماد الناجم عن عملية الإشعاع التلقائي .

15-7 قواعد الانتقاء .

بيّنا في الفقرة السابقة ، ومن خلال حساب الانتقالات التي تحدث بين مستوى طاقي وآخر نتيجة للإشعاع الكهرمغنطيسي الساقط على الذرة ، أن احتمالية حدوث الانتقال تتناسب طرداً مع مربع العنصر المصفوفي الخاص بحد المفاعلة داخل مؤثر هاملتون ، والذي يربط بين الحالتين الطاقيتين قيد البحث . والآن ، سندرس الشروط التي يلزم تلبيتها من قبل عنصر المصفوفة المعني لكي لا يكون مساوياً الصفر . وتعرف هذه الشروط باسم **قواعد الانتقاء** . فإذا كانت المفاعلة البرمية ـ المدارية تدخل كجزء ضمن مؤثر هاملتون غير المضطرب وحدّ المفاعلة الاشعاعية

يعدّ حدّاً اضطرابياً في المؤثر المذكور ، فإن الحالات الطاقية المستقرة سوف توسم بالأعداد الكمية j و ℓ و m_j و n. وضمن تقريب ثنائي الأقطاب الكهربائي ، يتخذ العنصر المصفوفي ، والذي يحدد الانتقالات من حالة طاقية إلى أخرى ، الشكل التالي : $(jlm_jn|\mathbf{P}|j'l'm_j'n')$.

لنتذكر أن مؤثر الزخم P ينتمي إلى جملة المؤثرات التي تقع في صف معلوم سلفاً هو الصف T ، وذلك فضلاً عن مؤثري الزخم الزاوي L وJ (انظر الفصل التاسع)، مما يعني أن علاقات المبادلة من (81−9) إلى (86−9) قائمة . ومن المفيد ، أثناء دراسة عناصر مصفوفة P ، أن نمثل المركبات الثلاث لهذا المؤثر المتجهي عبر التراكيب التالية :

$$\begin{aligned} P_+ &= P_x + iP_y, \\ P_- &= P_x - iP_y, \\ P_z & \end{aligned} \qquad (15-94)$$

لنفرض الآن أن قواعد الانتقاء تتحقق بالنسبة لـ m_j . وبناءً على المعادلة (81−9)، يتبادل J_z وP_z وبالتالي ، فإن العناصر المصفوفية التي لا تساوي الصفر والتي يمكن الحصول عليها لأجل P_z ، هي فقط تلك التي تحقق الشرط $\Delta m_j = 0$. ولكي نتأكد من ذلك شكلياً ، يلزمنا فقط أن نكتب علاقة المبادلة على شكل معادلة مصفوفية :

$$J_zP_z - P_zJ_z = 0 \qquad (15-95)$$

إن عناصر المصفوفة J_z معروفة ، وذلك بحكم أن التمثيل المستخدم يعتمد دالات هي الدالات المميزة لـ J_z ، وتلك العناصر هي :

$$(jlm_jn|J_z|j'l'm_j'n') = m_j\hbar\,\delta_{m_jm_j'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{jj'}\,\delta_{nn'} \qquad (15-96)$$

وبحساب العناصر المصفوفية لأجل المبادل ، سنصل من المعادلة (95−15)إلى :

$$(jlm_jn|[J_z,P_z]|j'l'm_j'n') = 0 \qquad (15-97)$$

وبعد كتابة جداءي المصفوفتين والاستفادة المباشرة من (96−15)، نجد أن :

$$(m_j\hbar - m_j'\hbar)(jlm_jn|P_z|j'l'm_j'n') = 0 \qquad (15-98)$$

من هنا يتضح أن عناصر المصفوفة P_z تتلاشى عندما $m_j \neq m_j'$.
وهكذا ، فإن قاعدة الانتقاء $m_j = 0$ قائمة .

وعلى نحو مماثل ، وبعد استبدال T بـ P في المعادلة (85—9)، يمكننا الحصول على العلاقة التالية :

$$(J_z - \hbar)P_+ - P_+J_z = 0 \qquad (15-99)$$

وبالاستفادة ثانية من العنصر المصفوفي (96—15) نجد أن :

$$(m_j\hbar - m_j'\hbar - \hbar)(jlm_jn|P_+|j'l'm_j'n') = 0 \qquad (15-100)$$

من هنا يتضح أن عناصر المصفوفة +P سوف تتلاشى ، إلا في حالة تغير m_j بزيادة قدرها 1 :

$$\Delta m_j = m_j - m_j' = 1 \qquad (15-101)$$

وبطريقة مشابهة ، سنجد أن عناصر المصفوفة ـP لا تتلاشى فقط عندما :

$$\Delta m_j = -1 \qquad (15-102)$$

ويمكن إجمال هذه النتائج بالاشارة إلى أن :

$$(jlm_jn|\mathbf{P}|j'l'm_j'n') = 0 \qquad (15-103)$$

وذلك باستثناء الحالات :

$$\Delta m_j = 0, \pm 1. \qquad (15-104)$$

تتمتع قاعدة الانتقاء هذه بتفسير فيزيائي بسيط . فلنأخذ مجال الإشعاع المكنى ، حيث أن الفوتون المستقطب دائرياً يحمل واحدةً من الزخم الزاوي ؛ ولذا فإنه يسلك كجسيم برمه 1 . وبالتالي ، وعندما يتعرض هذا الفوتون للامتصاص ، فإنه يستطيع تغير المركبة Z من الزخم الزاوي الاجمالي j بمقدار الواحد كل مرة ، أو تركه دون تغيير . وهذا يفترض أنه لا يجري نقل للزخم الزاوي المداري أثناء الانتقال الخاص بثنائي الأقطاب .

لننظر الآن في قاعدة الانتقاء لأجل j ويمكن من المعادلات (81—9)، وبعد قسط كبير من العمليات الجبرية الشاقة ، الحصول على العلاقة التالية :

$$J^4T - 2J^2TJ^2 + TJ^4 - 2\hbar^2(J^2T + TJ^2) + 4\hbar^2J(J \cdot T) = 0 \tag{15-105}$$

وواضح من المعادلة (82—9) أن (J.T) يبادل J^2 ، وبالتالي فإن العناصر الوحيدة التي لا تتلاشى في مصفوفة هذا الجداء ، هي التي تحقق الشرط $j = j'$. ولأن هذا صحيح أيضاً لأجل J ، ستكون العناصر الوحيدة المتميزة عن الصفر في مصفوفة الحد J(J.T) ضمن المعادلة (105—15)، هي تلك التي يتوافر لها الشرط $j = j'$. وبفرض أن $j \neq j'$ ، يمكننا كتابة الصيغة العامة لعنصر المصفوفة الخاصة بالمؤثر (105—15)، وذلك عندما $T \equiv P$:

$$\{[j(j+1)]^2 - 2j(j+1)j'(j'+1) + [j'(j'+1)]^2 - 2[j(j+1) + j'(j'+1)]\} \times (jlm_jn|P|j'l'm_j'n') = 0 \tag{15-106}$$

ونستطيع تبسيط هذه العلاقة لتصبح :

$$[(j + j' + 1)^2 - 1][(j - j')^2 - 1](jlm_jn|P|j'l'm_j'n') = 0 \tag{15-107}$$

وهكذا ، يتوجب على عناصر المصفوفة P أن تتلاشى جميعاً باستثناء تلك التي تحدث في J تغيراً قدره ± 1 . أما حالة $j = j'$ فقد تم استبعادها ، ضمن الاعتبارات التي أدت إلى المعادلة (107—15).

يمكننا أن نرى من النقاش السابق أن العناصر الوحيدة التي لا تتلاشى في مصفوفة P هي تلك التي يتغير فيها j بمقدار ± 1 أو 0 :

$$\Delta j = \pm 1, 0 \tag{15-108}$$

وتملك قاعدة الاصطفاء هذه الأخرى تفسيراً فيزيئاً بسيطاً . فالفوتون ، الذي يتم امتصاصه أو ابعاثه أثناء الانتقال ، يتميز بالكثير من خواص جسيم ذي برم 1 كما رأينا سابقاً . وهنالك ثلاث طرائق يمكن بها جمع الزخم الزاوي للفوتون متجهياً مع الزخم الزاوي الاجمالي للذرة : فهو يزيد الزخم الزاوي الاجمالي بمقدار 1 ، وهذه الحالات الثلاث تتوافق بوضوح مع قواعد الانتقاء (108—15).

وهناك شرط آخر يفرض على قاعدة الانتقاء الخاصة بـ j . فإذا قبلنا الآن بامكان أن يكون برم الجسيم عدداً صحيحاً ، كما أن j صحيح ، فإنه ينشأ سؤال عما

إذا كان يمكن حدوث الانتقال بين إحدى حالات $j = 0$ وحالة أخرى توافق $j=o$

ومثل هذا الانتقال ممنوع ، والبرهان على ذلك هو الآتي : تشكل الحالة $j = 0$ ، غير مفككة ، مما يترك « توجهاً » واحداً فقط للمتجه المذكور . وفي مثل هذه الحالة يكون الاتجاه المعتمد كمحور للتكمية اختيارياً إذا لم يطرأ تغير على الدالة الموجية في حالة $j = 0$ ، وذلك بسبب الانتقال من محور تكمية إلى محور آخر . ومن ناحية أخرى ، وبسبب قاعدة الانتقاء الخاصة بـ Δm_j ، يلبي محور التكمية الشرط التالي :

$$(0l0n|P_{\pm}|0l'0n') = 0 \qquad (15-109)$$

مما يفترض تلاشي عناصر المصفوفتين P_x وP_y . ونظراً لاختيارية اتجاه التكمية ، يتوجب على عناصر مصفوفة P_z أيضاً أن تساوي الصفر . لذلك ، فإن عناصر مصفوفات المركبات الثلاث لـ P جميعاً تساوي الصفر أثناء الانتقال من $j=o$ إلى $j = 0$.

وبما أن علاقات التبادل المعطاة في الفصل التاسع قائمة بالنسبة لـ L كما هي قائمة بالنسبة لـ J ، ينتج أننا نملك قواعد الانتقاء نفسها بالنسبة لـ ℓ ، ونحديداً ، فإن التغيرات الوحيدة المسموح بها لأجل ، هي :

$$\Delta l = \pm 1, 0 \qquad (15-110)$$

مع كون الانتقال من $\ell=o$ إلى $\ell=o$ ممنوعاً . إن هذه الشروط فعلياً ليست مقيّدة ، وذلك بما يكفي لجعل أي انتقال من نوع $\Delta\ell=o$ ممنوعاً . ولكي نرى ذلك ، سنلاحظ أن المؤثر P مؤثر وتري ، فهو يغير إشارته مع تغير إشارات الاحداثيات الثلاث للجسيم ، وعليه ، فإن عناصر المصفوفة P ، والتي تضم حالات يتساوى بينها l ، يجب أن تساوي الصفر ، وكذلك نظراً لأن الدالة المميزة لـ L هي إما شفعية أو وترية وتبعاً لكون l شفعياً أو وترياً . وهذا ما يستبعد إمكان الانتقالات التي لا يتغير فيه ℓ .

لذا ، تكون قاعدة الانتقاء بالنسبة لـ ℓ هي :

$$\Delta l = \pm 1 \qquad (15-111)$$

ومن الواضح أيضاً ، وبناءً على ما سبق ذكره ، أن تماثل الدالة الموجبة يجب أن

يتغير أثناء الانتقال .

تسري قواعد الانتقال الواردة أعلاه على الانتقالات الخاصة بثنائي الأقطاب الكهربائي ، وهي التي يمكن حدوثها عندما نستطيع كتابة الحد الأساسي للمفاعلة في (15−68) وفقاً للصيغة التي وردت في المعادلة (15−72). فإذا اتفق أن تكون قواعد الانتقاء المعطاة سابقاً تدل على الانتقال بين مستويين ما ممنوع ، فإن الحدود ذات المراتب العليا في النشر (15−69) قد تسفر عن عناصر مصفوفية لا تساوي الصفر . وفي حالة كهذه يسمى الانتقال **انتقال المراتب العليا لمتعدد الأقطاب** (مثلاً ، انتقال رباعي الأقطاب الكهربائي)، وبالرغم من أن **انتقال المرتبة الأولى ممنوع** ، فإنه ليس **ممنوعاً حصراً** ، بمعنى أنه ليس ممنوعاً بالنسبة لجميع مراتب التقريب . وإن الانتقالات من $j = 0$ إلى $j = 0$ ممنوعة حصراً ، ولأجل جميع المراتب $(I = 0)$، وذلك بسبب الزخم الزاوي للفوتون أو ـ وهو أمر مكافىء لذلك ـ بسبب كون الموجة S غير موجودة ضمن الأمواج الكهرمغنطيسية .

15−8 خلاصـــة .

لقد تعلق هذا الفصل بالمفاعلة من الجسيمات والمجال الكهرمغنطيسي القوي الذي يكون اتساعه على قدر يسمح بمعالجة المجال كلاسيكياً دون خطأ مفروض . ولقد تم تمثيل مؤثر هاملتون الخاص بالجسيم بوساطة الكمونين الكلاسيكيين ، المتجهي A والسلمي ϕ . ثم تمّ توضيح عدة من أمثلة استعراضية هامة ، فكان أولها حالة الالكترون في مجال مغنطيسي منتظم ، حيث بيّنا أنها على تشابه قريب شكلياً مع حالة المتذبذب التوافقي البسيط ثنائي الأبعاد .

بعدئذ ، جرت دراسة تأثير زيمان في المجالات التي تكون ضعيفة بالمقارنة مع تشعب البنية الدقيقة . وتم تعريف النسبة الدوّامية المغنطيسية ، أو العامل g ، ومناقشتها بلغة النموذج المتجهي . كذلك عالجنا تأثير زيمان في المجال القوي بوساطة الطرائق الاضطرابية .

وأخيراً عولجت ـ وضمن تقريب ثنائي الأقطاب ـ مسألة فائقة الأهمية ، هي مسألة الانتقالات الرنينية التي يحثها المجال الكهرمغنطيسي مابين حالتين من الحالات الطاقية للذرة . وتم تعريف المقطع العرضي للامتصاص ومعامل الامتصاص ، واستخلاص التعابير المتعلقة بهما . كما استخلصت قواعد الانتقاء لأجل انتقالات

ثنائي الأقطاب الكهربائي ، والتي تشير إلى الحـالات الذرية التي تستطيع الترابط فيما بينها بانتقالات يحثها الاشعاع .

مسائل

15—1 تتألف الحالة الدنيا للذرة البوزيترونية المشابهة للهيدروجين المكونة من بوزيترون والكترون مترابطين عبر المفاعلة الكولومية بينهما ، من أربع حالات جزئية : أحادية وثلاثية . ويكون المستوى الأحادي هو المستوى الأكثر استقراراً ، ويقع على 8×10^{-4} الكتروناً فولطاً تحت مستويات الثلاثي التي هي مستويات غير مفككة في ظل انعدام المجال الخارجي . احسب تأثيرات المجال المغنطيسي في هذا النظام . (يتميز البوزيترون بشحنة وعزم مغنطيسي مساويين من حيث المقدار ، ولكن معاكسين الإشارة ، شحنة الالكترون وعزمه المغنطيسي).

15—2 يتحرك الكترون في مجال كهرساكن مركزي . وتتصف كل حالة طالقية سلبية بقيمة محددة للزخم الزاوي المداري وتفكك كل مستوى هو $2(2l+1)$. بيّن أن أخذ المفاعلة البرمية ـ المدارية والمفاعلة مع المجال المغنطيسي الخارجي المنتظم بالحسبان يزيل التفكك بشكل كامل ، ولكنه لا يغيّر « مركز الجاذبية » الخاص بكل مستوى طاقي غير مضطرب .

15—3 تسمى الذرة التي لاتملك عزماً مغنطيسياً دائماً أنها ذات مغنطيسية معاكسة . وباهمال برم الالكترون والبروتون ، بيِّن كيفية حساب عزم المغنطيسية المعاكسة المُحثَث لدى ذرة الهيدروجين في حالتها الطاقية الدنيا ضمن مجال مغنطيسي ضعيف .

15—4 أ) بيِّن أن ثابت العزل الاستقطابي لدى HCL يتوقف فقط على مقدار انشغال المستوى الاهتزازي الأدنى . ب) وبفرض أن الجزيئات تتكون من إيونين Cl^- و H^+ تفصل بينهما مسافة d وكل منهما يحمل شحنة كهربائية واحدة ، احسب التبعية الحرارية لثابت العزل الاستقطابي . ج) افترض قيمة معقولة لأجل d واحسب ثابت العزل الاستقطابي . د) قارن هذه النتيجة مع القيمة التجريبية .

15–5 يؤثر مجال تردد إشعاعي في غاز HCL . أ) بفرض أن التردد مجاور لتردد الرنين الخاص بالانتقال بين الحالة الدنيا والحالة الاهتزازية المهيَّجة الأولى ، احسب مقدار امتصاص الطاقة الاشعاعي من قبل الغاز . افترض الافتراضين التاليين :
١) يتألف جزيء HCL من إيونين تفصل بينهما مسافة d ، وكل منهما يحمل شحنة كهربائية واحدة ؛ ٢) يستدعي التصادم بين جزيئين توازناً حرارياً ، والمقطع العرضي للتصادم يساوي σ . ب)بين كيف يتغير الامتصاص مع التردد والضغط والحرارة .

15–6 صِف تأثير زيمان في الهيدروجين الذري .

15–7 إذا كانت نواة ذرية تملك برماً يساوي I ويرافقها عزم مغنطيسي يساوي μ ، وإذا كان بمقدور المفاعلة بين هذا العزم والعزم المغنطيسي المرافق لزخم الالكترون الزاوي J أن يشعِّب المستويات الى مستويات جزئية متعددة تتوافق مع الحالات المختلفة للزخم الزاوي الاجمالي $F = J + I$. وتعرف مثل هذه التشعبات والتي تكون صغيرة جداً على العموم ، باسم **التشعُّبات مفرطة الدقة** .
ويتميز في ذرة الهيدروجين البروتون ب $I = \frac{1}{2}$ ، مما يؤدي الى حالة دنيا تتكون من مستويين يوافقان $F = 1$ و $F = 0$ ويساوي التباعد مفرط الدقة في الحالة الدنيا للهيدروجين 1420 MC/sec . أ) احسب احتمالية أن يحدث انتقال مُحَث من أحد المستويات الطاقية مفرط الدقة إلى الآخر ، وذلك بسبب نبضة من المجال الترددي الإشعاعي . ب) بيِّن أنه إذا كان متجه المجال المغنطيسي مستقطباً باتجاه موازٍ لمحور التكمية ، فإن الانتقال الوحيد الذي يمكن حدوثه هو انتقال من $m_F = 0$ إلى $m_F = 0$. جـ) بيِّن أنه إذا تلت نبضة مماثلة من المجال الترددي الاشعاعي بعد $(n/2.84) \times 10^{-9}$ ثانية من النبضة الأولى (حيث n عدد صحيح وتري)، فإن انتقالات المرتبة الأولى لا يمكن حدوثها .

15–8 أ) احسب القيمة التقريبية لثابت العزم الاستقطابي للهيليوم في ظل حرارة وضغط عاديين . ب) قارن النتيجة مع القيمة التجريبية (**توجيه : استخدم قاعدة** الجمع (15–87)).

15–9 أ) استخدم مؤثري المرقاةاللذين عرضا في الفصل السادس ، المعادلة

(6−74)، وذلك للحصول على المؤثرين اللذين يولدان الدالات الموجية (15−20)   ب) بيّن في هذا الصدد أن المؤثر :

$$R^2 \equiv R_{x+}^2 + R_{y+}^2$$

يزيد العدد الكمي n اثنين دون تغيير المستويات m_j ، حيث ان :

$$R_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2m}} P_x + i\sqrt{\frac{k}{2}}\, x$$

والخ .

جـ) بيّن كذلك أن المؤثر $(R_{z+} \pm iR_{y+})$ يزيد n واحداً ويزيد أو ينقص m_ℓ واحداً .   د) اكتب الشكل الواضح .للمؤثر الذي يولّد الدالة $\psi_{nm_lp_s}$ ، وذلك بفرض أن المؤثر يؤثر في الدالة ψ_{00p_s} .

15−10 بيّن أن الدالتين (15−51) و(15−52) متعامدتان .

15−11 بناء على الفقرات 2−10 و2−12 و2−15 يمكن كتابة الدالات الموجية للحالات المستقرة لذرة الهيدروجين على النحو التالي :

$$\psi_{n,l,j=l\pm 1/2,m_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{bmatrix} \sqrt{l+\frac{1}{2}\pm m_j}\; Y_{l,m_j-1/2} \\ \pm\sqrt{l+\frac{1}{2}\mp m_j}\; Y_{l,m_j+1/2} \end{bmatrix} R_{nl}$$

ويتضمن هذا المفاعلة البرمية ـ المدارية التي تعالج ضمن التقريب الأدنى (انظر الفقرة 2−14). استخدم المعادلة (14−51) لحساب تشعب البنية الدقيقة في الحالة 2P .

الفصل السادس عشر
التبعثـــر

16-1 المفاهيم الفيزيائية .

سبق لنا في الفصل الثالث أن درسنا مسألة بسيطة حول التبعثر وحيد البعد ، حيث عولجت الموجة الساقطة في حالة ميكانيك الكم على حاجز كموني قائم الزاوية . وعموماً ، فإن موضوع التبعثر أو الزيغان الذي يتعرض له جسيم أو أكثر ، وذلك بسبب المفاعلة مع مركز التبعثر ، هو موضوع فائق الأهمية في الفيزياء الحديثة . ولربما كانت الأمثلة الأكثر لفتاً للنظر موجودة في الفيزياء النووية ، حيث أن معظم المعطيات القاعدية للفيزياء النووية تستحصل عبر تبعثر حزم من الجسيمات ، كالبروتونات أو الالكترونات أو الميزونات ، عن درئيات مختلفة على شكل جسيمات . ففي حالة القوى النووية ، فإن أشكال المفاعلة بين الجسيمات ليست معروفة ، وتستخدم معطيات التبعثر التجريبية لأجل استخلاص المعلومات حول تحديد الأشكال الممكنة لقانون القوى ، أي لأجل تحديد أية أشكال تنسجم مع المعطيات وأية أشكال لا تنسجم ؟

إن مفهوم **المقطع العرضي للتبعثر** مفيد جداً لدراسة المفاعلة بين حزمة من الجسيمات ومركز التبعثر وعندما تسقط حزمة يساوي تدفقها N جسيماً /سم٢/ ثانية على مركز تبعثر ، فإنه يمكننا عادةً أن نجد كيف تغادر الجسيمات مركز التبعثر في جميع الاتجاهات . وليكن dN هو تدفق الجسيمات التي تتعرض للتبعثر عبر عنصر فراغي ذي زاوية حجمية dω حول الاتجاه المميز بالزاويتين القطبيتين θ و ϕ . ونتوقع أن يكون dN متناسب طرداً مع التدفق الساقط N ومقدار الزاوية الحجمية dω :

$$dN = \sigma(\theta, \phi) N \, d\omega \qquad (16-1)$$

حيث رمزنا إلى ثابت الاحتمالية ـ وهو عموماً دالة تابعة لـ θ و ϕ ـ بالرمز $\sigma(\theta, \phi)$. وتبيّن دراسة هذه المعادلة أن $\sigma(\theta, \phi)$ له قياس المساحة . وبما أن توزيع الجسيمات على المستوى المعامد للحزمة يعدّ منتظماً ، فمن الواضح أن التفسير المناسب

هو أن $\sigma(\theta, \phi)$ يمثل المقطع العرضي للحزمة الساقطة ، والذي تمر عبره كل الجسيمات التي تتعرض للتبعثر ضمن $d\omega$ بزاويتين هما θ و ϕ . ولهذا السبب ، يعرف ثابت التناسب باسم **المقطع العرضي التفاصيلي لتبعثرالحزمة** . وإذا كاملنا المعادلة (16-1) على جميع الزوايا الحجمية ، لنحصل على التدفق الاجمالي للجسيمات التي تتعرض للتبعثر من قبل المركز ، فإن النتيجة تحدّد **المقطع العرضي الاجمالي للتبعثر** σ_t :

$$
\begin{aligned}
N_{\text{scat}} &= \int dN = \int \sigma(\theta, \phi) N \, d\omega \\
&= N \int \sigma(\theta, \phi) \, d\omega \qquad (16-2) \\
&= N\sigma_t
\end{aligned}
$$

يجري التعامل وفي بعض الحالات مع مواقف تقوم الدريئة فيها بامتصاص جسيمات من الحزمة إلى جانب التبعثر الذي يجري ومن الواضح أن **المقطع العرضي الاجمالي للامتصاص** يمكن تعريفه على نحو مماثل . وإن مفهوم المقطع العرضي يمكن تعميمه لاحقاً بالطريقة السابقة ليشمل انتاج الجسيمات والفوتونات وتحويل الدرئيات .

لقد افترضنا خلال النقاش السابق أن الدريئة تتكون من مركز تبعثر مثبّت ، وأن الزاويتين θ و ϕ ، اللتين تستخدمان لوصف التبعثر ، تعطيان ضمن نظام الاحداثيات الكروية ، والذي تتطابق بدايته مع مركز التبعثر . ولكن مراكز التبعثر في الواقع العملي غير مثبتة أبداً ، بل تنكص بفعل قوى المفاعلة التي تسبب التبعثر ، ولذا فإن مركز التبعثر في نكوصه يمتص بعض الطاقة (والزخم) من الجسيم الساقط ، ويتوقف المقدار الدقيق للامتصاص على زاوية التبعثر وعلى تناسب الكتل بين الجسيمات الساقطة وجسيمات الدريئة . وفي هذا الموقف الأكثر واقعية يتوافر نظامان للاحداثيات ، ويمكن نسبةً إليهما وصف التبعثر ويتمتع هذان النظامان بمدلول علمي .

يكون النظام الأول ، والذي يعرف باسم **النظام المخبري**. مثبّتاً في الفراغ ، ويقع في حالة سكون إسوةً بجسيمات الدريئة (قبل النكوص). وهذا النظام هو النظام الذي ترتبط به كل الزوايا التي تقاس فعلياً في المخبر أثناء إجراء التجربة .

هذا ، في حين أن **نظام مركز الكتلة** أكثر ملاءمة أثناء تحليل القياسات التبعثرية

وذلك بلغة كمون المفاعلة بين جسيمات الحزمة والدريئة . وكما يتبين من التسمية ، فإن مركز كتلة النظام المكون من « جسيم ساقط ـ جسيم دريئة » يبقى ثابتاً في هذا النظام . ويمكن في نظام مركز الكتلة توصيف التبعثر وكأنه تجري من مركز تبعثر ثابت (هو مركز الكتلة) مع بقاء الجسيمين (الساقط والذي يقع في الدريئة) على خط متحد مع هذا المركز ، بينما يتحرك كلاهما نحو المركز أو بعيداً عنه بزخمين متساويين .

ينشأ الخط المتحد بسبب حفظ الزخم ، ويجب أن تكون الزاوية السمتية نفسها في نظامي الاحداثيات . ولكن الزاوية θ ، والتي تقيس تغيّر الاتجاه بين زخم الجسيم الساقط الابتدائي (قبل التبعثر) والنهائي (بعد التبعثر)، تختلف من نظام إلى آخر . وتبين الحجج الهندسية الأكيدة (انظر الشكل (16-1)) أن العلاقة بين الزاويتين تعطى بالعلاقة التالية :

$$\tan \theta_{\text{lab}} = \frac{\sin \theta_{\text{c.m.}}}{\cos \theta_{\text{c.m.}} + m_1/m_2} \qquad (16-3)$$

حيث m_1 كتلة الجسيم الساقط و m_2 كتلة الدريئة . ومن الواضح أنه عندما $m_2 \gg m_1$ ، فإن الانتقال من الزوايا المقيسة في المخبر إلى الزوايا المنسوبة إلى مركز الكتلة ـ وهي أكثر مدلولاً من الناحية الفيزيائية ـ يسفر عن تغيرات صغيرة في مقدار الزاوية .

$m_1 v_{\text{i.l.}} = (m_1 + m_2) V$

$v_{\text{i.c.m.}} = v_{\text{o.c.m.}} = v_{\text{c.m.}}$

$v_{\text{c.m.}} \sin \theta_{\text{c.m.}} = v_{\text{o.l.}} \sin \theta_{\text{l.}}$

$v_{\text{c.m.}} \cos \theta_{\text{c.m.}} + V = v_{\text{o.l.}} \cos \theta_{\text{l.}}$

$$\frac{V}{v_{\text{c.m.}}} = \frac{m_1 V}{m_1 (v_{\text{i.l.}} - V)} = \frac{m_1 V}{(m_1 + m_2) V - m_1 V} = \frac{m_1}{m_2}$$

الشكل *16 – 1* العلاقة بين زاوية التبعثر في نظامَيْ إحداثيات المخبر ومركز الكتلة. وتشير الدلائل i,o.,ℓ,C.m. وبالترتيب، إلى كل من الجُسيم الساقط والجُسَيم المغادر والنظام المخبري ونظام مركز الكتلة.أما V فهي سرعة مركز الكتلة.

تعتمد المعادلة (16-3)على التصور الكلاسيكي حول مسارات الجسيم .

ولكن العلاقة بين نظامي الأسناد يحددها حصراً المبدأان الأساسيان لحفظ الطاقة وحفظ الزخم ، ولأن هذين المبدأين ساريان على حد سواء في نظرية الكم والنظرية الكلاسيكية ، فإن المعادلة (3—16) تنطبق على مسألتي التبعثر الكماتية والكلاسيكية وبالدرجة نفسها .

يمكن ، وكما رأينا سابقاً ، توصيف حزمة الجسيمات موحدة الطاقة في ميكانيك الكم ، وذلك بوساطة الموجة المستوية . فهذه الموجة ذات الانتشار في الاتجاه العرضي ، ولذلك ـ وبناء على علاقة عدم التحديد ـ لا يمكنها أن تتكون من جسيمات حرة ذات زخوم وطاقة معروفة على وجه الدقة . ولكن هذا لا يفسد توصيف الحزمة موحدة الطاقة بوساطة الموجة المستوية ، إذ أن القياس الحجمي للمقطع العرضي للحزمة الكبيرة يجعل عدم التحديد في الزخم غير ذي شأن .

يمكن ، ومن خلال توصيف ميكانيك الكم للتبعثر ، تقسيم الدالة الموجية الاجمالية ، والتي تصف « مسار » الجسيم ، إلى جزءين يمثل أحدهما الجسيم قادماً والآخر يمثل الجسيم بعد التبعثر . وكما لوحظ أعلاه ، بوسعنا عدّ الجزء الساقط موجة مستوية . وعندئذ يمكن كتابة الدالة الموجية على الشكل التالي :

$$\psi = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + v \qquad (16-4)$$

حيث : v تمثل الموجة (الجسيم) بعد التبعثر ولتكن بداية الاحداثيات في مركز التبعثر . ومركز الكتلة هو بداية الاحداثيات الملائمة للمراكز التعثرية غير المثبتة ـ بعيداً عن دريئة التبعثر ، فإنه يتوجب على الموجة بعد التبعثر أن تمثل تدفق جسيمات تتحرك شعاعياً نحو البعيد . لذلك يجب أن يكون للموجة بعد التبعثر الشكل المقارب التالي :

$$v \xrightarrow[r\to\infty]{} f(\theta, \phi)\,\frac{\exp(ikr)}{r} \qquad (16-5)$$

حيث : $f(\theta, \phi)$ تصف التبعية الزاوية للموجة بعد التبعثر ويتضح من هذا الشكل أن v تمثل موجة مغادرة . وإنه لمن السهولة بمكان التأكد من أن (5—16) تلبي ـ وعلى نحو مقارب ـ معادلة شرودينغر للجسيم الحر . ويمكن حساب تدفق الجسيم S في الموجة بعد التبعثر من المعادلة التالية :

$$S = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\bar{v}\nabla v - (\nabla\bar{v})v\right] \qquad (16-6)$$

أي أن :

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar k}{m}\,\frac{|f(\theta,\,\phi)|^2}{r^2}\,\mathbf{r}_0 - \frac{i\hbar}{mr^3}\,\mathrm{Im}\left[\bar{f}(\theta,\,\phi)\,\frac{\partial f}{\partial \theta}\right]\boldsymbol{\theta}_0 - \frac{i\hbar}{mr^3 \sin\theta}\,\mathrm{Im}\left[\bar{f}(\theta,\,\phi)\,\frac{\partial f}{\partial \phi}\right]\boldsymbol{\phi}_0 \qquad (16-7)$$

حيث r_0 ، θ_0 ، ϕ_0 هي وبالترتيب ، متجهات واحدية في اتجاهات تعاظم r، θ ، ϕ . وفي حال القيم الكبيرة لـ r حيث المعادلة (16−5) سارية المفعول ـ تكون المركبة الشعاعية وحدها الهامة . (تشير Im إلى الجزء الخيالي) . أي أن :

$$S_r = \frac{\hbar k}{m}\,\frac{|f|^2}{r^2} = \frac{v|f|^2}{r^2} \qquad (16-8)$$

(وتمثل v في هذه المعادلة السرعة الكلاسيكية للجسيم وليس الموجة بعد التبعثر) .

ويجب أن نلاحظ أن هذه المعادلة هي عددياً كثافة الاحتمالية مضروبة بالسرعة . أما بالنسبة للتدفق الواحدي المضمر في المعادلة (16−4)، فهذه هي كثافة الجسيم مضروبة بالسرعة . ويمكن عدّ جميع الجسيمات تذهب بعيداً ، كما يمكن ربط الدالة $f(\theta,\,\phi)$ بالمقطع العرضي التفاضلي $\sigma(\theta,\,\phi)$ لأجل مركز التبعثر ، وذلك من خلال مفارنة المعادلتين (16−1) و(16−8). ومن المعادلة (16−1) نجد أن التدفق الشعاعي المغادر ضمن زاوية حجمية dω ، هو $N\sigma\, d\omega$, ، حيث : N التدفق الساقط . وبوسعنا تعديل هذه المعادلة لأجل التدفق المغادر منسوباً إلى واحدة المساحة وعلى بعد rمن مركز التبعثر ، ولتصبح كما يلي :

$$d\omega = \frac{dA}{r^2} \qquad (16-9)$$

وبهذا الشكل ، يكون التدفق المغادر ضمن الزاويتين θ و ϕ عبر واحدة المساحة ، هو :

$$S_{\text{scat}} = \frac{N\sigma}{r^2} \qquad (16-10)$$

ويتم الحصول على التدفق الساقط N بتطبيق المعادلة (16−6) على exp(ikz) ، وهي الجزء الساقط ضمن المعادلة (16−4)، حيث يعطي ذلك النتيجة التالية :

$$N = S_{\text{inc}} = \frac{\hbar k}{m} = v \qquad (16-11)$$

لهذا ، فإن :

$$S_{\text{scat}} = \frac{v\sigma}{r^2} = \frac{v|f|^2}{r^2} \qquad (16-12)$$

وأن :

$$\sigma(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2 \qquad (16-13)$$

ويجب أن نلاحظ أننا ، وأثناء حسابنا لتدفقات كثافة الاحتمالية ، كنا نأخذ جزءي المعادلة (4—16) كلًا على حدة متجاهلين بذلك الحدود التداخليةبين exp (ikz) و v ، والتي كانت ستبرز لو أن المعادلة (4—16) استخدمت وحدها في حساب التدفق S . إن كون هذا الاجراء دقيقاً أمر يمكن رؤيته على النحو التالي : تتمثل حزمة الجسيمات الساقطة بالحد exp (ikz) ، والذي يوافق حزمة لا نهائية الانتشار في الاتجاه العرضي بالنسبة لاتجاه انتشار الحزمة . وهذا مستحيل فيريائياً ، وفي الواقع يتعامل المرء داخل المخبر مع حزم محصورة في منطقة محددة بدقة في الفراغ . فالحدود الداخلية بين exp (ikz) ، وv تمثل ذلك الموقف الذي تكون فيه الحزمتان ، الساقطة والمغادرة ، متواجدتين معاً داخل مكشاف الجسيمات . ولكن الحزمة الساقطة غائبة هناك ، حيث يتم عادةً (وأثناء التجارب) الكشف عن الحزمة المغادرة ، أي بعيداً عن الدريئة . وتنطبق الحدود المذكورة فقط على المناطق التي تتراكب فيها الموجتان الساقطة والمغادرة . والتأثير الأكثر أهمية لمثل هذا التداخل هو فقد جسيمات الحزمة الأصلية بسبب التبعثر ولو أن القياسات كانت تجري في منطقة يتواجد فيها الجسيمان الساقط والمغادر كلاهما ، لكان من الضروري استخدام جهاز ما لانتقاء الزخوم ، وذلك كي يمرر فقط الجسيمات المغادرة ، إذ أن هذا من شأنه إزالة التأثير التداخلي .

لقد تجاهلنا أثناء النقاش آنف الذكر الحدود غير الشعاعية في المعادلة (7—16)، وذلك نظراً لأن سرعة تناقضها ، وعند ازدياد r ، أكبر بكثير من سرعة تناقض الحد الشعاعي . ومع ذلك ، فهي تملك تفسيراً فيزيائياً هاماً . فكما سنرى ، وبتفصيل موجز ، تتضمن الموجة المستوية الساقطة مركّبات موافقة لزخم زاوي متميز عن الصفر في جوار مركز التبعثر . ويتوافق ذلك كلاسيكياً مع كون معالم الصدم لدى الجسيمات متميزة عن الصفر ، بعض أجزاء الحزمة الساقطة غير موجهة تماماً نحو

دريئة التبعثر . وإن التبعية الشعاعية $1/r^3$ في تدفق الموجة بعد التبعثر جوهرية بالنسبة لحفظ الزخم الزاوي . وبما أنه يمكن تفسير S بعدّها كثافة الجسيمات مضروبة بسرعتها ، فإن بمقدورنا تفسير r.S بمثابة كثافة الزخم الزاوي . وبناء على المعادلة (7—16) تتمتع هذه الكثافة بتبعية شعاعية هي $1/r^2$ ، مثلها في ذلك مثل المركّبة الشعاعية من تدفق الجسيم ، مما يقود إلى حفظ الزخم الزاوي للجسيمات عندما تتحرك بعيداً عن المركز بعد التبعثر .

ثمة جانب مثير في عملية التبعثر يمكن رؤيته بدراسة تبعثر الجسيمات من قبل حاجز كبير عندما تكون طاقة الجسيمات الساقطة كبيرة بما فيه الكفاية لكي يبدو طول موجة دي برولي الخاص بحزمة الجسيمات صغيراً بالمقارنة مع قياس الحاجز . ومن المقارنة مع حالة تبعثر الضوء كلاسيكياً من قبل جسم كبير غير شفاف ، يتضح أنه سوف تكون هناك منطقة « ظل » خلف دريئة التبعثر ، حيث لن توجد جسيمات . ولذلك يجب أن تكون موجة ما بعد التبعثر ضمن الدالة الموجية في المعادلة (16-4) ، والتي تصف عملية التبعثر — وعلى نحو تلتغي معه الموجة الساقطة **exp(ikR)** في منطقة الظل هذه. وبكلمات أخرى، يجب على الموجة بعد تبعثرها في المنطقة المذكورة أن تتساوى، ومن حيث الاتساع (وبالتالي من حيث التدفق) — ورغم التعاكس من حيث الطور ـ مع الموجة الساقطة،ولو أنه لا توجد أية جسيمات في تلك المنطقة.ويقود هذا الموقف التناقضي إلى الظاهرة التي تعرف باسم تبعثر الظل.

وبحكم وجودها فقط ضمن المقطع العرضي لدريئة التبعثر تتعرض الموجة التي يتم تبعثرها نحو الأمام لعملية الحيود . ونظراً للحيود ، فإن موجة تبعثر الظل تمثل جسيمات تعرضت للتعثر . وتحيد هذه الموجة ضمن زوايا صغيرة جداً إذا كانت الدريئة كبيرة ، في حين يساوي المقطع العرضي للتبعثر المساحة التي تتعرض للقذف من ضمن سطح الدريئة . وإضافةً إلى الجسيمات التي تتعرض لتبعثر الظل نحو الأمام ، يتم تبعثر جميع الجسيمات التي تضرب السطح الجبهي للدريئة ، وذلك بفرض أنه لا يحدث امتصاص للجسيمات . وعليه ، فإن المقطع العرضي للتبعثر الناجم عن الحاجز يساوي ضعف مساحته التي تتعرض للقذف .

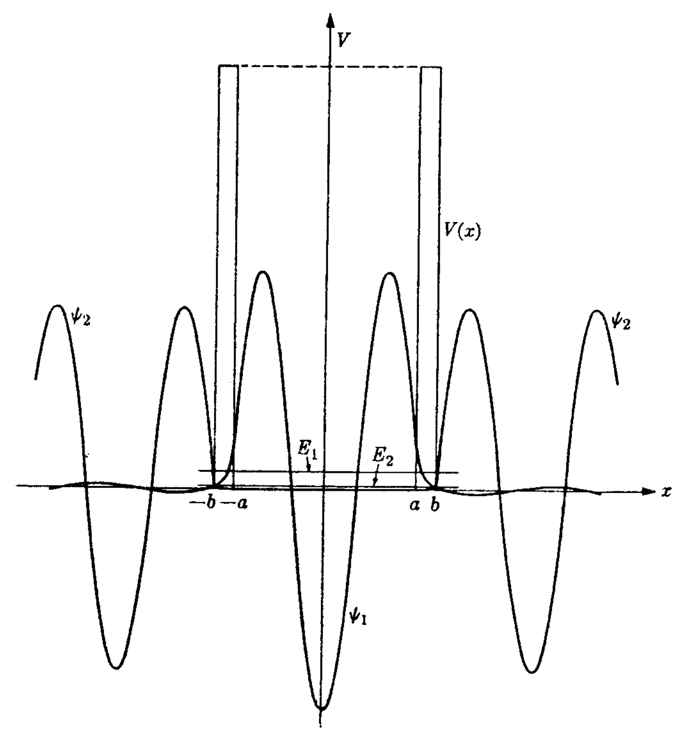
إن مفهوم المستوى الطاقي التقديري أو الحالة التقديرية هو أيضاً ذو أهمية بالنسبة لمناقشة بعض ظواهر التبعثر . ولنأخذ الحالة وحيدة البعد المعروضة في الشكل (2—16). فكما رأينا في الفصل الثالث ، يمكن إيجاد حلول معادلة شرودينغر لأجل

كمون كهذا بالنسبة لجميع قيم الطاقة E الموجبة . ولكن ، إذا كان الحاجزان الكمونيان ، ومابين $x = \pm a$ و $x = \pm b$ ، غير نافذين ، أي إذا كان :

$$(V - E)^{1/2}(b - a) \gg 1 \qquad (16-14)$$

فإن مقدار الاحتمالية $|\psi|^2$ ، ولأجل قيم طاقية محددة ، سوف يتخذ ـ وبين الحاجزين $(-a \leqslant x \leqslant a)$ ـ قيماً أكبر منها خارج الحاجزين $(|x| > |b|)$.

ويبين الحساب التفصيلي أن قيم E المشار إليها تساوي بالضبط تلك التي توجد لأجلها الحالات المقيدة الداخلية إذا كان الحاجزان فعلاً غير نافذين . وتعرف مثل هذه الحالات باسم **الحالات الطاقية التقديرية** ، وهي هامة بالنسبة لمسائل التبعثر ، وذلك لأنه حين تكون طاقة الجسيمات الساقطة موافقة



الشكل 16-2 كمون تبعثر وحيد البعد يمكن أن تنشأ عنه «حالات تقديرية»، حين تتموضع الأمواج (شبه) المستقرة بين الحاجزين الكمونيين في منطقة $-a \leq x \leq +a$. وإن ψ_1 هي الدالة الموجية الموافقة للحالة الطاقية التقديرية، بينما ψ_2 فهي دالة موجية نموذجية لطاقة «ليست في الرنين».

حين تتموضع الأمواج (شبه) المستقرة بين الحاجزين الجهديين ، في منطقة $-a \leq x \leq a$. ψ_1 هي الدالة الموجية الموافقة للحالة الطاقية التقديرية ، بينما ψ_2 دالة موجية نموذجية لطاقة « ليست في الرنين »

لحالة كهذه ، فإن الشرط الرنيني يتحقق ، ويكون المقطع العرضي للتبعثر أكبر ، وبشكل ملحوظ ، منه في حالة الطاقات غير الرنينية . وليست هذه الحالات الطاقية مستدقة بشكل لا متناه ، بل توافق نطاقاً من طاقات الجسيم ، ويتزايد عرض الرنين مع تزايد النفاذ عبر الحاجزين . ويمكن في بعض الحالات ثلاثية الأبعاد ، حيث الكمون $V_{(r)}$ دون الصفر في كل مكان $V(r) < 0$ ظهور الحالات التقديرية في ظل الطاقات الموجبة للجسيمات التي تقارب مركز التبعثر بزخم زاوي لا يساوي الصفر . وفي مثل هذه الحالة ، باستطاعة « الكمون النابذ مركزياً » (انظر الفصل العاشر) أن يوفر الحاجز الكموني اللازم .

16–2 تقريب بورن .

هناك صف هام من مراكز التبعثر يمكن تصنيفه بوصفه يتميز بكمون متموضع وضعيف : متموضع من حيث أنه لا يحدث تبعثر ذو شأن بعيداً عن مركز الدريئة ؛ وضعيف من حيث أن الموجة بعد التبعثر أضعف بكثير من الموجة الساقطة . ويمكن التعبير عن الشرط الأخير بالعودة إلى المعادلة (16–4) وفي الحالة التي يكون فيها :

$$|\exp(ikz)| = 1 \gg |v| \qquad (16-15)$$

وإذا عوضنا المعادلة (16–4) في معادلة شرودينغر :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \qquad (16-16)$$

ستكون النتيجة :

$$-\nabla^2 v - k^2 v = -U\exp(ikz) - Uv \qquad (16-17)$$

حيث :

$$U \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V \qquad (16-18)$$

ويكمن تقريب بورن في استخدام الشرط (16–15) لمقاربة المعادلة (16–17)

وذلك من خلال العلاقة التالية :

$$\nabla^2 v + k^2 v = U \exp(ikz) \qquad (16-19)$$

وهذا مكافىء من الناحية الفيزيائية للقول إن التبعثر يحدث كما لو أن موجة شدتها الكاملة هي exp(ikz) ويسقط على كل جزء من كمون التبعثر . ويتوافق هذا الأمر بالطبع مع الافتراض بأن كمون التبعثر ضعيف ، ويمكن حل المعادلة (16−19) بوساطة دالة غرين ω ، والتي تشكل حلاً للمعادلة :

$$\nabla^2 w + k^2 w = -4\pi\, \delta(r - r') \qquad (16-20)$$

(سوف نعدّ خلال كل العرض اللاحق الدالة دلتا S دالة غير شاذة لها ذروة مستدقة في r=ŕ . أما الانتقال إلى النهاية الشاذة فسوف ينجز في مرحلة مؤاتية لاحقة ، وذلك ، حيث تظهر الدالة تحت إشارة تكامل ملائم). ويمكن في النهاية المناسبة كتابة حل المعادلة (16−20)كالآتي :

$$w = \frac{\exp(ik|r - r'|)}{|r - r'|} \qquad (16-21)$$

ويمكن عبر دالة غرين أن نكتب حل المعادلة (16−19) على الشكل التالي :

$$v(r) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{\exp(ik|r - r'|)}{|r - r'|}\, U(r') \exp(ikz')\, dr' \qquad (16-22)$$

وكما هو واضح من الشرح التالي : لنضرب المعادلة (16−20) بـ v ، ولنضرب المعادلة (16−19) بـ w ، ثم نطرح النتيجتين ، وعندئذٍ نحصل على :

$$(v\nabla^2 w - w\nabla^2 v) = -4\pi\, \delta(r - r')v - wU \exp(ikz) \qquad (16-23)$$

وبعد المكاملة على كامل الفراغ وتطبيق مبرهنة غرين(*) ، نجد أن :

---

* انظر :

(*)H. Margenau and G. M. Murphy, *Mathematics of Physics and Chemistry*, D. Van Nostrand Co., Inc., New York, 1949, p. 156. P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics, Part I*, McGraw-Hill Book Co., Inc., New York, 1953, pp. 803 ff.

$$\int_{\text{كل الفراغ}} (v\nabla^2 w - w\nabla^2 v)\, dr = \int_{\text{كرة نصف قطرها : } R=\infty} (v\nabla w - w\nabla v) \cdot dS \qquad (16-24)$$

$$= -4\pi v(r') - \int_{\text{كل الفراغ}} wU \exp(ikz)\, dr$$

ويمكن تقدير التكامل السطحي في اللانهاية ، وذلك باستخدام المعادلات المناسبة لأجل السلوك المقارب للدالة قيد المكاملة . وعندما $r\to\infty$ ، تصبح المعادلات التالية للسلوك المقارب (انظر الشكل (16-3)) :

$$v \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{\exp(ikr)}{r} f(\theta, \phi),$$

$$|r - r' \xrightarrow[r\to\infty]{} r - r' \cos\alpha, \qquad (16-25)$$

$$\frac{1}{|r - r'|} \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{r} + \frac{r'\cos\alpha}{r^2},$$

$$w \xrightarrow[r\to\infty]{} \exp(-ikr'\cos\alpha) \frac{\exp(ikr)}{r} \left(1 + \frac{r'\cos\alpha}{r}\right),$$

$$\nabla w \xrightarrow[r\to\infty]{} \left(ik - \frac{1}{r} - \frac{r'\cos\alpha}{r^2}\right) w r_0,$$

$$\nabla v \xrightarrow[r\to\infty]{} \left(ik - \frac{1}{r}\right) v r_0 + \frac{\exp(ikr)}{r^2} \left(\frac{\partial f}{\partial\theta} \theta_0 + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial\phi} \phi_0\right)$$

حيث : r_0 , θ_0 , ϕ_0 — متجهات واحدية متعامدة . ونلاحظ بسهولة من هذه العلاقات أن :

$$(v\nabla w - w\nabla v) \xrightarrow[r\to\infty]{} - \frac{\exp(2ikr)\exp(-ikr'\cos\alpha)}{r^3} \left(\frac{\partial f}{\partial\theta} \theta_0 + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial f}{\partial\phi} \phi_0\right) \qquad (16-26)$$

و :

$$\int (v\nabla w - w\nabla v) \cdot dS \xrightarrow[r\to\infty]{} 0 \qquad (16-27)$$

وهكذا نجد أن المعادلة(16-24) مكافئة للمعادلة (16-22) ويمكن إضفاء شكل مختلف على المعادلة (16-22) وذلك من خلال الاستخدام اللاحق للتقريبات (16-25) :

$$v \xrightarrow[r\to\infty]{} -\frac{1}{4\pi}\int \frac{U(r')\exp(ikz')\exp[ik(r-r'\cos\alpha)]}{r}\,dr'$$
$$\longrightarrow -\frac{\exp(ikr)}{4\pi r}\int \exp[ik(z'-r'\cos\alpha)]U(r')\,dr' \qquad (16-28)$$

وبعد ان نرمز الى المتجه الموجي للحزمة الساقطة بـ k_0 والمتجه الموجي للحزمة بعد التبعثر بـ k ، سيكون لدينا :

$$kz' = k_0 \cdot r', \qquad kr'\cos\alpha = k\cdot r' \qquad (16-29)$$

ولذلك ، فإن :

$$v \xrightarrow[r\to\infty]{} -\frac{\exp(ikr)}{4\pi r}\int \exp[i(k_0-k)\cdot r']U(r')\,dr' \qquad (16-30)$$

لنعرّف المتجه K على أنه :

$$K \equiv k_0 - k \qquad (16-31)$$

وهو بذلك يمثل تغيّر المتجه الموجي بسبب تبعثر الجسيم الساقط . وعندها ، فإن :

$$v \xrightarrow[r\to\infty]{} -\frac{\exp(ikr)}{4\pi r}\int \exp(iK\cdot r')U(r')\,dr' \qquad (16-32)$$

والتبعثر يتحدد اذاً من خلال تحويل فورييه الخاص بكمون التبعثر مأخوذاً عبر تغير المتجه الموجي K . وعند مقارنة هذه المعادلة مع المعادلة (16-5) ، نرى أن :

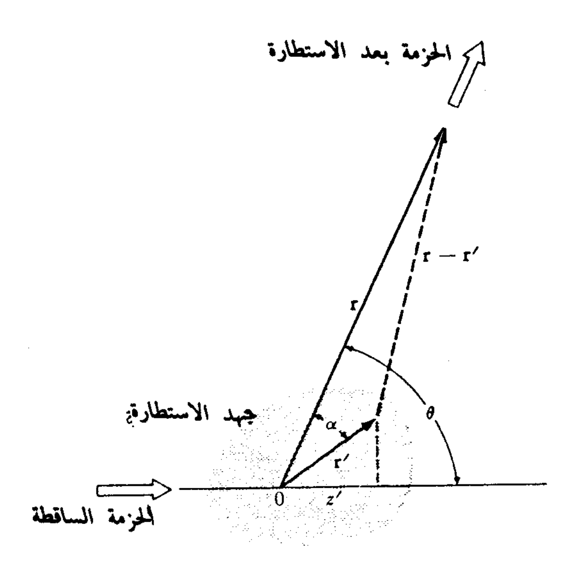
$$f(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int \exp(iK\cdot r')U(r')\,dr' \qquad (16-33)$$

ويكون المقطع العرضي التفاضلي للتبعثر الموافق هو :

$$\sigma(\theta,\phi) = \frac{1}{(4\pi)^2}\left|\int \exp(iK\cdot r')U(r')\,dr'\right|^2 \qquad (16-34)$$

وكاستعراض لتطبيق هذه الصيغة ، سندرس تبعثر جسيمات عالية الطاقة من قبل كمون كروي (ضحل):

$$V = V_0, \qquad r \le a,$$
$$= 0, \qquad r > a \qquad (16-35)$$



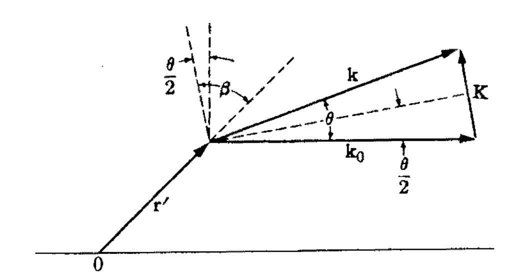
الشكل 16-3. العلاقات الهندسية بين المتجهين **r** و**r′** والتي تستخدم لحساب تبعثر الجُسيمات ضمن تقريب بورن. وهنا، يمثل **r** المتجه الواصل بين مركز الإحداثيات المطابق لمركز الذريئة والنقطة التي يجري فيها حساب الموجة بعد التبعثر، أما **r′** فهو المتجه الموضعي لنقطة ضمن كمون التبعثر و α هي الزاوية بين **r** و**r′**.

ونستطيع من الشكل (16−4) أن نرى إمكان كتابة التكامل (16−34) على الشكل التالي :

$$\int = \int_{r'=0}^{a} \int_{\beta=0}^{2\pi} \exp\left(2ik_0 \sin\frac{\theta}{2}\, r' \cos\beta\right) \frac{2m}{\hbar^2}\, V_0 \cdot 2\pi r'^2\, dr' \sin\beta\, d\beta \tag{16−36}$$

وهذا ما يتسنى تقديره بسهولة :

$$\int = \frac{\pi m V_0}{\hbar^2 k_0^3 \sin^3(\theta/2)}\left[\sin\left(2k_0 a \sin\frac{\theta}{2}\right) - 2k_0 a \sin\frac{\theta}{2}\cos\left(2k_0 a \sin\frac{\theta}{2}\right)\right] \tag{16−37}$$



الشكل **4-16**. العلاقات الهندسية المستخدمة في حساب التبعثر الناجم عن كمون كروي (ضحل) ضمن تقريب بورن. θ هي زاوية الاستطارة، β هي الزاوية بين التغير المتجهي للزخم**K**. ومتجه الموضع **r**.

وبالنسبة لزوايا التبعثر الصغيرة ، فإن هذا يقارب ما يلي :

$$\int \xrightarrow[\theta\to 0]{} \frac{8\pi m V_0 a^3}{3\hbar^2} \qquad (16-38)$$

بينما يقارب المقطع العرضي التفاضلي الآتي :

$$\sigma(\theta) \xrightarrow[\theta\to 0]{} \frac{4m^2 V_0^2 a^6}{9\hbar^4} \qquad (16-39)$$

وهكذا ، فإن تزايد التبعثر عبر الزوايا الصغيرة أسرع بكثير من تزايد المقطع العرضي الهندسي بسبب ازدياد نصف قطر التبعثر . واذا كان $k_0 a \gg 1$ فإن الحد الثاني ما بين قوسين في المعادلة (16−37) هو الذي يحدد التبعثر عبر الزوايا $k_0 a\theta \gg 1$ ، وعندئذٍ :

$$\int \approx -\frac{2\pi m V_0 a}{\hbar^2 k_0^2 \sin^2(\theta/2)} \cos\left(2k_0 a \sin\frac{\theta}{2}\right) \qquad (16-40)$$

وهذا يوافق المعادلة التالية للمقطع العرضي التفاضلي :

$$\sigma(\theta) = \frac{m^2 V_0^2 a^2}{4\hbar^4 k_0^4 \sin^4(\theta/2)} \cos^2\left(2k_0 a \sin\frac{\theta}{2}\right) \qquad (16-41)$$

وعليه ، فان المقطع العرضي هو دالة لـ θ سريعة التأرجح ، ويؤدي حساب القيمة

المتوسطة عبر هذه التأرجحات السريعة الى :

$$\overline{\sigma(\theta)} = \frac{m^2 V_0^2 a^2}{8\hbar^4 k_0^4 \sin^4(\theta/2)} \qquad (16-42)$$

وذلك بمقارنة هذه النتيجة مع المعادلة الخاصة بتبعثر روذرفورد للجسيم المشحون من قبل كمون كولومي* ، أي أن :

$$\sigma(\theta) = \frac{m^2 (ZZ'e^2)^2}{4\hbar^4 k_0^4 \sin^4(\theta/2)} \qquad (16-43)$$

وهكذا ، يتبين وجود تشابه لافت للنظر من حيث التبعية الزاويّة (المتوسطة) للتبعثر . وفي الواقع ، فإن المقطعين العرضيّين يتطابقان ، وذلك إذا اخترنا ارتفاع الكمون الكروي V_0 بحيث يساوي الطاقة الكولومية للجسيم الساقط في تبعثر روذرفورد عندما يبعد هذا الجسيم عن الدريئة مسافة a (مساوية نصف قطر الكمون الكروي).

3-16 الأمواج الجزئية .

توجد معالجة اخرى لمسائل التبعثر ذات فائدة معينة ، وذلك حين يكون كمون التبعثر ذا تناظر كروي ومتموضعاً . وتعرف هذه المعالجة باسم **الأمواج الجزئية** ، وذلك نظراً لأنها تعتمد تفكيك الدالة الموجية الى أمواج كروية .

وقبل دراستنا لطريقة الأمواج الجزئية في معالجة مسائل التبعثر ، سوف ندرس تمثيل الدالة الموجية بأمواج كروية ، وقد نوقش قبلاً في الفقرة 10−4 . ويكون مؤثر هاملتون للجسيم الحر هو :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\mathrm{P}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad (16-44)$$

وكما سبق وأشرنا في الفصل التاسع يتبادل H هذا مع مؤثر الزخم الزاوي L ، وبالتالي مع L^2 . وتشكل المؤثرات الثلاثة L^2 و Lz و H جملة متبادلة ، ويمكن اختيار الدالات الموجية لتكون دالات مميزة مشتركة لهذه المؤثرات الثلاثة كلها . ويمكن كتابة هذه

انظر :

(*)H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass., 1950, Chapter 3.

الدالات الموجية على النحو التالي :

$$\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad (16-45)$$

تساوي طاقة الجسيم :

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (16-46)$$

والدالة $Y_{lm}(\theta, \phi)$ هي ، كالعادة ، توافقية كروية . أما الدالة الشعاعية $R_{kl}(r)$ فهي ، وكما في المعادلة (10−4) ، تلبي المعادلة :

$$\frac{1}{2m} P_r^2 R + \frac{l(l+1)^2}{2mr^2} R = E_k R \qquad (16-47)$$

حيث :

$$P_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \cdot r \qquad (16-48)$$

والحل ، في حالة ℓ=o ، هو :

$$R_{k0} = \begin{cases} \dfrac{\sin kr}{kr}, \\ \dfrac{\cos kr}{kr} \end{cases} \qquad (16-49)$$

يجب استبعاد جيب التمام cos كحلٍّ لأجل الجسيم الحر وذلك لأنه شاذ في بداية الاحداثيات

وأحياناً ، تُعرَّف حلول المعادلة (16−49) ، باسم دالتي بسل ونيومان الكرويتين من مرتبة الصفر :

$$j_0(kr) \equiv \frac{\sin kr}{kr}, \qquad n_0(kr) \equiv -\frac{\cos kr}{kr} \qquad (16-50)$$

أما الدالة الشعاعية j_0 فتحقق علاقة الاستنظام على دالة دلتا :

$$\int_0^\infty j_0(kr) j_0(k'r) r^2 \, dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k-k') \qquad (16-51)$$

كما يمكن تعبيرها بوساطة تدفق الجسيم :

$$j_0 = \frac{\exp(ikr)}{2ikr} - \frac{\exp(-ikr)}{2ikr} = \frac{1}{2}h_0^{(1)}(kr) + \frac{1}{2}h_0^{(2)}(kr) \qquad (16-52)$$

حيث إن :

$$h_0^{(1)}(kr) = j_0(kr) + in_0(kr) \qquad (16-53)$$

و :

$$h_0^{(2)}(kr) = j_0(kr) - in_0(kr) \qquad (16-54)$$

هما من دالات **هانكل الكروية** . ونلاحظ أن المعادلة (52–16)تمثل موجة مستقرة تتكون من مجموع جزءين يوافقان الموجة القادمة والموجة المغادِرة . ويكون التدفق الاجمالي للموجة المغادِرة :

$$W = 4\pi r^2 S_r = -4\pi r^2 \frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{1}{4}\overline{h_0^{(1)}}\frac{d}{dr}h_0^{(1)} - \frac{1}{4}\frac{d}{dr}\overline{h_0^{(1)}}\cdot h_0^{(1)}\right]\cdot|Y_{00}|^2$$
$$= \frac{\hbar}{4mk} \qquad (16-55)$$

ولكي نجد حلول المعادلة الشعاعية(47–16) لأجل قيم ℓ كافة ، فإن من المناسب أن نستفيد من مؤثرات الصف T (الفصل التاسع) لتوليد حلول أخرى من الحلين (49–16) اللذين قد حصلنا عليهما . ويبادل مؤثر الزخم $P = i\hbar\nabla$ ، مؤثر هاملتون ، وينتمي $P_+ = P_x + iP_y$ الى الصف + T . وكما بيّنا في الفصل التاسع ، فإن المؤثر + P عندما يؤثر في دالة مميزة لـ L^2 و Lz ، بحيث $\ell = m$ ، يسفر عن دالة مميَّزة جديدة لهذين المؤثرين توافق زيادةً بمقدار الواحد في قيمة كل من الدليلين m و ℓ . وطالما أن +P يبادل H ، فان الدالة الناتجة هي أيضاً دالة مميزة لـ H . ولذلك فإن الدالة :

$$\psi_{kll} = P_+^l \psi_{k00} \qquad (16-56)$$

هي حل لمعادلات القيمة المميزة لـ H, L^2, L_z . وبما أن ψ_{k00} دالة تابعة فقط لـ r ، يمكن كتابة هذه النتيجة كالتالي :

$$\psi_{kll}(kr) = (-i\hbar)^l\left(\frac{x+iy}{r}\right)^l r^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \psi_{k00} \qquad (16-57)$$

وبإهمال عوامل الاستنظام ، يؤول ذلك الى :

$$\psi_{kll} \sim Y_{ll}(\theta, \phi)\left(\frac{r}{k}\right)^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \psi_{k00} \qquad (16-58)$$

ومن الواضح أن الدالة الشعاعية غير الشاذة يمكن كتابتها على النحو التالي :

$$j_l(kr) = \left(-\frac{r}{k}\right)^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l j_0(kr) \qquad (16-59)$$

(لقد تم اختيار الاشارة لتتفق مع التعريف المعتاد لدالة بسل الكروية) . ثم يجري توليد دالتي نيومان وهانكل الشاذتين بالطريقة نفسها ، وذلك من خلال تعويض الدالة الموافقة الشاذة في الجهة اليمنى . ويمكن عدُّ المعادلة (59—16) تعريفاً لهذه الدالات . ويتضح من الطريقة التي يتم بها توليد تلك الدالات أن هذه الدالات تلبي المعادلة الشعاعية (47—16)، والتي يمكننا تبسيطها لتصبح :

$$\frac{d^2 j_l(x)}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dj_l(x)}{dx} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right] j_l(x) = 0 \qquad (16-60)$$

وتكون دالات بسل ونيومان الكروية ، ولأجل القيم الثلاث الأولى من l ، كما يلي :

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \qquad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x},$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \qquad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x},$$

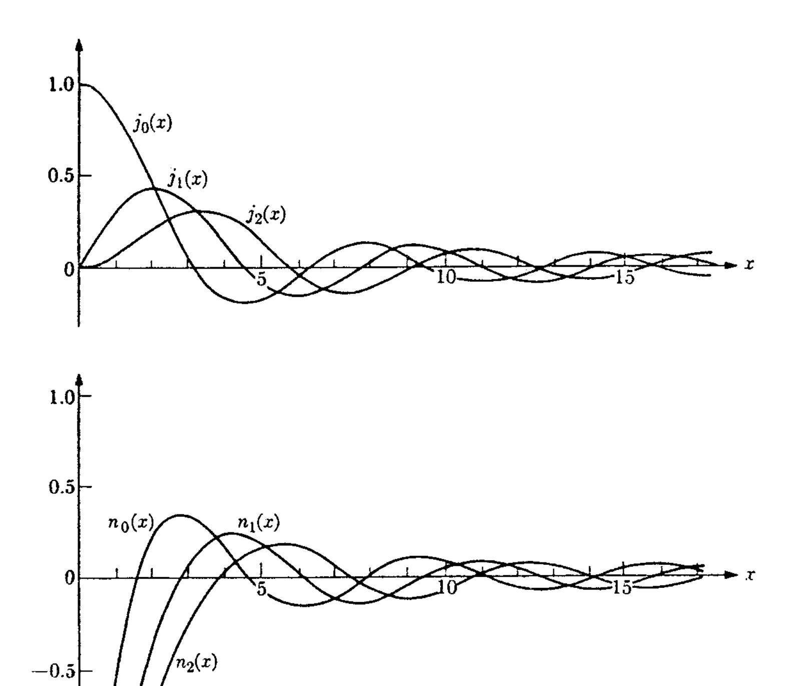
$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3}{x^2}\cos x, \qquad (16-61)$$

$$n_2(x) = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3}{x^2}\sin x$$

وتبدو هذه الدالات مرسومة على الشكل (5—16) . ومع تزايد مرتبة دالة بسل الكروية ، تتزايد أيضاً قيم x التي تكون الدالة فيها متميزة عن الصفر بقدر ملحوظ . ولأجل قيم r الصغيرة ، تؤول المعادلة (59—16) الى :

$$j_l(x) \xrightarrow[x\to 0]{} \frac{x^l}{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l+1)},$$

$$n_l(x) \xrightarrow[x\to 0]{} -\frac{1\cdot 1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l-1)}{x^{l+1}} \qquad (16-62)$$



الشكل 16 −5 . دالات بسل ونيومان الكروية ، لأجل $l= 0,1,2$.

وتكون المعادلتان المتعلقتان بالسلوك المقارب لـ j_l و n_l كما يلي :

$$
\begin{aligned}
j_l(x) &\xrightarrow[x\to\infty]{} \frac{1}{x}\cos\left[x-\frac{\pi}{2}(l+1)\right] \\
n_l(x) &\xrightarrow[x\to\infty]{} \frac{1}{x}\sin\left[x-\frac{\pi}{2}(l+1)\right]
\end{aligned}
\qquad (16-63)
$$

أما الصيغة الملائمة للدالة الموجية الموافقة لقيم محددة من قيم $\mathbf{L}_z$ L^2 H ، فهي :

$$\psi_{klm} = Y_{lm}(\theta, \phi) j_l(kr) \qquad (16-64)$$

والدالة مستنظمة ، بحيث أن اجمالي تدفق الجسيم المغادر (أو القادم) يساوي :

$$W = \int r^2 S_r \, d\Omega \qquad (16-65)$$

حيث :

$$S_r = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\overline{\psi^{+}_{klm}}\,\frac{\partial}{\partial r}\,\psi^{+}_{klm} - \frac{\partial}{\partial r}\,\overline{\psi^{+}_{klm}}\cdot\psi^{+}_{klm}\right] \qquad (16-66)$$

و :

$$\psi^{+}_{klm} = \tfrac{1}{2} Y_{lm}(\theta, \phi) h^{(1)}_{l}(kr) \qquad (16-67)$$

هي الجزء المغادر من ψ ؛ أي الجزء الشعاعي من دالة هانكل . وتجري مكاملة المعادلة (16−65) على جميع الزوايا الحجمية لأجل نصف قطر مثبّت . وإن تقدير S_r الأكثر ملاءمة ممكنٌ في منطقة السلوك المقارب . فتدفق الجسيم المغادِر ، وبناءً على المعادلة (16−63) لايتوقف على ℓ ويعطى بالعلاقة :

$$W = \frac{\hbar}{4mk} \qquad (16-68)$$

يتوجب نشر الموجة المستوية عبر دالات من نمط المعادلة (16−64) وذلك لأنها تشكل جملة تامة . وإنه لمن المناسب أخذ الدالة الموجية في الاتجاه z ، فالدالة الموجية في هذه الحالة لاتتوقف على الزاوية ϕ ، ونشرها يتضمن فقط الحدود $m = 0$:

$$\exp(ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l Y_{l0}(\theta) j_l(kr) \qquad (16-69)$$

وكما بيّنا في الفصل التاسع ، يمكن الحصول على Y_{l0} من :

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \frac{1}{(2l!)^{1/2}}\,\frac{1}{\hbar^l}\,L^{l}_{-} Y_{ll} \qquad (16-70)$$

و :

$$Y_{ll} = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\,(-1)^l\left[\frac{(2l+1)!}{2}\right]^{1/2}\frac{1}{2^l l!}\exp(il\phi)\sin^l\theta \qquad (16-71)$$

ولكي نقدّر معامِلات النشر c_l ، نضرب المعادلة (16− 69) بـ Y_{lm} ، ونكاملها ضمن جميع الزوايا الحجمية لأجل r مثبّتاً :

$$c_l j_l(kr) = \int \overline{Y_{l0}} \exp (ikz) \sin \theta \, d\theta \, d\phi \qquad (16-72)$$

وبتعويض $\overline{Y_{l0}}$ من (70-16)، نجد أن :

$$\begin{aligned} c_l j_l(kr) &= \frac{1}{(2l!)^{1/2}} \frac{1}{\hbar^l} \int \overline{L_-^l Y_{ll}} \exp (ikz) \sin \theta \, d\theta \, d\phi \\ &= \frac{1}{(2l!)^{1/2}} \frac{1}{\hbar^l} \int \overline{Y_{ll}} L_+^l \exp (ikr \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \, d\phi \\ &= \frac{i^l \pi^{1/2} (2l+1)^{1/2}}{2^l l!} (kr)^l \int_0^\pi \sin^{2l} \theta \exp (ikr \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \end{aligned} \qquad (16-73)$$

ولقد تمت هنا الاستفادة من تعبير +L المعطى في المعادلة (39-9).

من الجليّ أن الطرف الأيمن يجب أن يشكل طريقةً لتوليد دالة بسل الكروية ، وبخاصة عند المرور الى النهاية $\to 0$ ، وبالاستفادة من المعادلة(62-16)لأجل الطرف الأيسر ، يكون لدينا :

$$c_l = i^l [4\pi(2l+1)]^{1/2} \qquad (16-74)$$

ولأن :

$$\exp (ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l [4\pi(2l+1)]^{1/2} Y_{l0}(\theta) j_l(kr) \qquad (16-75)$$

يمكن التعبير عن Y_{l0} على شكل حدودية لوجاندر (راجع الفصل التاسع):

$$Y_{l0}(\theta) = \left[\frac{2l+1}{4\pi}\right]^{1/2} P_l (\cos \theta) \qquad (16-76)$$

وهكذا يكون :

$$\exp (ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l (\cos \theta) j_l(kr) \qquad (16-77)$$

ويجب أن نلاحظ أن :

$$j_l(kr) = \tfrac{1}{2}[h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)] \qquad (16-78)$$

وكل واحدة من الأمواج الكروية الجزئية في (77-16) تتكون من موجة قادمة وموجة مغادِرة . فمن المعادلتين (68-16) و (75 - 16) يكون إجمالي تدفق الاحتمالية

القادم هو :

$$W_l = \frac{\pi\hbar}{mk}(2l+1) \qquad (16-79)$$

ويساوي تدفق كثافة الاحتمالية لأجل الموجة المستوية مايلي :

$$S = \frac{\hbar k}{m} \qquad (16-80)$$

ونسبة هذين التدفقين للاحتمالية هي :

$$\sigma_l = \frac{W_l}{S} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1) = \frac{\lambda^2}{4\pi}(2l+1) \qquad (16-81)$$

سوف نسمي σ_l **المقطع العرضي للموجة الجزئية** ، وهو - فيزيائياً - المساحة الفعالة حول بداية الاحداثيات والتي يمكن أن يصيبها جسيم في الحالة ℓ من حيث الزخم الزاوي .

نستطيع الحصول على المعادلة (16-81) بالطريقة « الكلاسيكية » التالية . ويمر ، كلاسيكياً الجسيم ذو الزخم $P = \hbar k$ بمركز الاحداثيات على مسافة $[l(l+1)]^{1/2}k^{-1}$ اذا كان مربع زخمه الزاوي يساوي $l(l+1)\hbar^2$. ولنفترض أن مساحة الحلقة المستديرة ، والتي نصف قطرها الداخلي يساوي :

$$[(l-\tfrac{1}{2})(l+\tfrac{1}{2})]^{1/2}k^{-1}$$

ونصف قطرها الخارجي يساوي :

$$[(l+\tfrac{1}{2})(l+\tfrac{3}{2})]^{1/2}k^{-1}$$

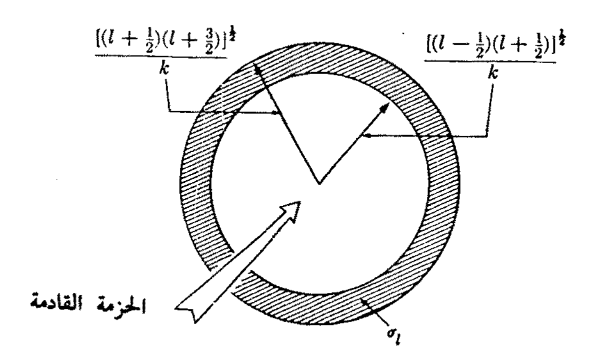
مساوية مساحة الدريئة σ_l أثناء الاقتراب من مركز التبعثر . عندئذٍ نجد أن :

$$\sigma_l = \frac{\pi}{k^2}[(l+\tfrac{1}{2})(l+\tfrac{3}{2}) - (l-\tfrac{1}{2})(l+\tfrac{1}{2})]$$

$$= \frac{\pi}{k^2}(2l+1) \qquad (16-82)$$

وهذا ما يعرضه الشكل (16-6).

كنا ندرس حتى الآن الدالة الموجية للجسيم الحر فقط . أما الآن ، فسنفترض



الشكل 16-6. المقطع العرضي «الكلاسيكي» لأجل الجُسيم الكلاسيكي الذي يقارب مركز التبعثر، ممتلكاً لَمعلم زخم يجعل مربع الزخم الزاوي مساوياً لـ $l(l+1)\hbar^2$.

أن هناك دريئة ذات تناظر كروي في مركز الاحداثيات . وتبادل مؤثرات الزخم الزاوي مؤثر هاملتون ، وتنعكس الموجة الجزئية القادمة ذات المؤشر ℓ على هيئة موجة من الطراز نفسه ، أي أنه لايوجد تبعثر يؤدي الى اخراج الجسيمات من حالات زخمها الزاوي . ولنأخذ موجة قادمة كروية من الشكل :

$$\psi_{klm}^{-} = \tfrac{1}{2} Y_{lm}(\theta, \phi) h_l^{(2)}(kr) \qquad (16-83)$$

ففي حال عدم وجود دريئة للتبعثر في مركز الاحداثيات ، فإن هذه الموجة تنطوي عند المركز المذكور وتتحول الى موجة مغادرة :

$$\psi_{klm}^{+} = \tfrac{1}{2} Y_{lm}(\theta, \phi) h_l^{(1)}(kr) \qquad (16-84)$$

(انظر المعادلة (78–16) . وفي حالة الدريئة ذات التناظر الكروي ، وبفرض أنه لايوجد امتصاص للجسيمات ، يكون التأثير الوحيد للدريئة هو إحداث تغير في طور الموجة المغادِرة . وبوجود الدريئة ، تصبح الموجة المغادِرة ، عندئذٍ ، كالآتي

$$\psi_{klm}^{+} = \tfrac{1}{2} \exp(2i\delta_l) Y_{lm} h_l^{(1)}(kr) \qquad (16-85)$$

ويكون الانزياح الطوري σ_l مرتبطاً بالمفاعلة مع دريئة التبعثر كما سنرى بالتفصيل فيما بعد .

وبلغة دالات هانكل ، يؤول نشر الموجة المستوية (16−75) الى :

$$\exp(ikz) = \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty} i^l[4\pi(2l+1)]^{1/2} Y_{l0}(\theta)[h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)] \qquad (16-86)$$

وبوجود دريئة التبعثر ، تتعرض الموجة المغادِرة لانزياح طَوْريٍّ ، وتصبح الدالة الموجية :

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty} i^l[4\pi(2l+1)]^{1/2} Y_{l0}(\theta)[\exp(2i\delta_l)h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)] \\ &= \exp(ikz) + \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty} i^l[4\pi(2l+1)]^{1/2}[\exp(2i\delta_l) - 1] Y_{l0}(\theta)h_l^{(1)}(kr)\end{aligned} \qquad (16-87)$$

وهكذا ، يكون تأثير الدريئة هو الإسفار بعد التبعثر عن موجةٍ مغادرة من النمط :

$$v = \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty} i^l[4\pi(2l+1)]^{1/2}[\exp(2i\delta_l) - 1] Y_{l0}(\theta)h_l^{(1)}(kr) \qquad (16-88)$$

بالإضافة الى الموجة المستوية الأصلية . ويجب أن نلاحظ أن التدفق الاجمالي المغادِر في الموجة ذات الرقم ℓ هو نفسه في حالة غياب الدريئة ، ولكن الموجة المغادرة الآن قد تشعَّبت الى جزءين هما موجة ما بعد التبعثر والجزء المغادر من الموجة المستوية الساقطة .

نجد ، وبناءً على المعادلة (16−88) أن تدفق الاحتمالية المغادر بالنسبة لموجة ما بعد التبعثر ذات الرقم l يساوي التدفق الداخل للموجة الجزئية ذات الرقم ℓ مضروباً بالعامل $|\exp(2i\delta_l) - 1|^2$ ولذا ، فإن المقطع العرضي للتبعثر ضمن الموجة الجزئية ذات الرقم ℓ، بالانطلاق من المعادلة (16−81)، يساوي :

$$\sigma_l^{(s)} = \frac{\lambda^2}{4\pi}(2l+1)\cdot 4\sin^2\delta_l \qquad (16-89)$$

والمقطع العرضي الاجمالي للتبعثر هو :

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{scat}} &= \sum_l \frac{\lambda^2}{\pi}(2l+1)\sin^2\delta_l \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l\end{aligned} \qquad (16-90)$$

يظهر الحد الأعظمي للمقطع العرضي عندما يكون الانزياح الطَوري ، وبسبب التبعثر هو $\pm\pi/2, \pm3\pi/2, \ldots$. وهو أكبر بأربعة أضعاف من المقطع العرضي الداخل . وهكذا ، فإنه يمكن ، وضمن الموجة الجزئية ذات الرقم l ، تبعثر أربعة أضعاف عدد الجسيمات التي تصيب الدريئة . ويكون هذا السلوك التناقضي مرتبطاً بتبعثر الظل وبطريقة تعريفنا لموجة ما بعد التبعثر .

يجري أحياناً في الفيزياء النووية امتصاص الجسيمات من قبل النواة (أي دريئة التبعثر)، كما يمكن حدوث انبعاث للجسيمات . ويمكننا أثناء حساب التبعثر ، وفي حالة امتصاص الجسيم ، تجاهل الجسيمات التي تُخطِىء النواة ؛ ويجب أن يكون تدفق الجسيم المغادر في الموجة الجزئية ذات الرقم l أقل من التدفق القادم . ولازالت المعادلة (16−87) صالحة على أن يكون الجزء الخيالي من σ_l موجباً الآن .

يمكن تعريف المقطع العرضي للامتصاص على أنه :

$$\sigma_{\text{abs}} \equiv \sum_l \frac{\lambda^2}{4\pi}(2l+1)[1-|\exp(2i\delta_l)|^2] \qquad (16-91)$$

والمقطع العرضي للتبعثر هو كما في السابق ،

$$\sigma_{\text{scat}} = \sum_l \frac{\lambda^2}{4\pi}(2l+1)|1-\exp(2i\delta_l)|^2 \qquad (16-92)$$

ويجب أن نلاحظ أن المقطع العرضي الأعظمي للامتصاص بالنسبة للموجة الجزئية ذات الرقم l هو :

$$\sigma_{\text{abs}}^{(l)} = \frac{\lambda^2}{4\pi}(2l+1) \qquad (16-93)$$

وعندما يكون الامتصاص أعظمياً ، يكون مقدار التبعثر مساوياًله . ومرة أخرى ، نحن أمام موقف تناقضي : يتمخض امتصاص جميع الجسيمات الساقطة ضمن الموجة l عن تبعثر العدد نفسه من الجسيمات .

لم يُقَل شيء الى الآن عن كيفية حساب الانزياحات الطَورية σ_l . وسيكون وفقاً للمعادلة(16−87)الجزء الشعاعي من الدالة الموجية الجزئية l ، وفي حالة وجود الدريئة ، معطى بالعلاقة التالية :

$$R_l = \exp(2i\delta_l)h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \qquad (16-94)$$

وهو ما يمكن تسجيله على الشكل التالي :

$$R_l = 2 \exp (i\delta_l) [j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l] \qquad (16-95)$$

وهذا هو الحل الأكثر عمومية (بدون عامل الجداء) للمعادلة الشعاعية (16-47) ضمن المنطقة التي يكون كمون التبعثر فيها صفراً . وبما أنه كان قد جرى الافتراض بأن كمون التبعثر متموضع ، يمكننا إيجاد كرة نصف قطرها r_0 تكون المعادلة (16-95) خارجها سارية المفعول . ونستطيع إيجاد الانزياح الطوري δ_ℓ بوساطة ملاءمة الحل مع الحل القائم داخل الكرة $r = r_0$ ، وهو ما يمكن تحقيقه بالمساواة بين المشتقتين اللوغارتميتين للدالة الموجية على حدود الكرة .

لنأخذ مثالاً على طريقة الأمواج الجزئية عملية تبعثر حزمة من قبل كرة صلبة نصف قطرها a . ويكون شرط الملاءمة بين الحلين بسيطاً في هذه الحالة تحديداً ، فالدالة الموجية يجب أن تتلاشى في $r = a$:

$$j_l(ka) \cos \delta_l - n_l(ka) \sin \delta_l = 0 \qquad (16-96)$$

أو :

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \qquad (16-97)$$

فبالنسبة للجسيمات الساقطة ذات الطاقة المتدنية ، يتحقق الشرط $ka \ll 1$ ، وبوسعنا استخدام تقريب المعادلة (16-62) :

$$\tan \delta_l = \frac{(ka)^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)} \left[- \frac{(ka)^{l+1}}{1 \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)} \right]$$

$$= - \frac{(ka)^{2l+1} \cdot 2^{2l-1} l! (l-1)!}{(2l+1)!(2l-1)!} \qquad (16-98)$$

من هنا ، نرى أن δ_ℓ يتناقص بسرعة مع تزايد ℓ ، مما يجعل السلسلة في (16-90) تتقارب بسرعة . ولهذا ، فإن القسم الأعظم من التبعثر في حالة الجسيمات متدنية الطاقة ، حيث $Ka \ll 1$ ، ينجم عن الموجة ذات الرقم $\ell = 0$ ، وعملية التبعثر متناظرة كروياً (راجع المعادلة (16-87)) . ويعطى الانزياح الطوري بالعلاقة التالية :

$$\tan \delta_0 = \frac{j_0(ka)}{n_0(ka)} = \tan ka, \qquad (16-99)$$
$$\delta_0 = ka$$

التي يؤدي تعويضها في المعادلة (16−90) الى :

$$\sigma_{\text{scat}} \approx \frac{4\pi}{k^2}(ka)^2 = 4\pi a^2 \qquad (16-100)$$

وهكذا ، فإن تبعثر الجسيمات متدنية الطاقة هو لا اتجاهي ، ويساوي مقطعه العرضي أربعة أضعاف المقطع العرضي الهندسي للكرة الصلبة .

أما بالنسبة للجسيمات القاذفة عالية الطاقة ، فإن طريقة الأمواج الجزئية تفقد ـ عادةً ـ معظم فائدتها ، وذلك لأنه وفي هذه الحالة يتوجب دراسة عدة قيم من ℓ ، مما يجعل الحساب صعباً للغاية . ولكن حالة الدريئة الكروية الع لبة يمكن معالجتها بوساطة هذه الطريقة كالتالي : من المعادلة (16−97)يتبين أن :

$$\sin^2 \delta_l = \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)} \qquad (16-101)$$

واذا استخدمنا المعادلة (16−63) والخاصة بالسلوك المقارب لدالات بسل الكروية ، سنجد أن :

$$\sin^2 \delta_l \xrightarrow[ka\to\infty]{} \cos^2\left[ka - \frac{\pi}{2}(l+1)\right] \qquad (16-102)$$

في حالة الجسيمات عالية الطاقة $Ka \gg 1$ ، وطول موجة دي برولي لأجل الجسيمات الساقطة أصغر من نصف قطر الدريئة . ويمكن وانطلاقاً من الحجج « الكلاسيكية » التي تقود الى المعادلة (16−82)، رؤية أنه في النهاية « الكلاسيكية » للحالة $Ka \gg 1$ ، (وعندما طول موجة دي برولي أصغر من نصف قطر الدريئة) لن يكون بوسع الجسيمات الساقطة أن « تبصر » الدريئة عندما $l > ka$ ، ولكن يمكن توقّع انزياحات طورية ملائمة عندما $l < ka$.

نستطيع رؤية هذه النتيجة أيضاً بالعودة الى المعادلتين (16−62) و (16−63)فالنتيجة المقاربة(16 −102) صالحة فقط لأجل $l \ll ka$ ، بينما يتوجب الاستعاضة عنها في حالة $l \gg ka$ بالمعادلة الناجمة عن تعويض المعادلة (15−62) في

المعادلة(16−101). والنتيجة ستكون أن δ_l صغير الى حد يمكن تجاهله عندما $l \gg ka$. وهكذا يكون المجموع في المعادلة (16−90) عندما $ka \gg 1$ قابلاً للقطع عند الحد $l = ka$ وذلك بعد تعويض المعادلة 102 − 16) في الحدود التي لا تساوي الصفر . وبذلك يكون :

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) \cos^2\left[ka - \frac{\pi}{2}(l+1)\right] \qquad (16-103)$$

وبما أن $ka \gg 1$ ، فسيكون متغير جيب التمام في هذه المعادلة دالةً سريعة التغير تابعة لـ k ، ومن المعقول وأثناء حساب المجموع أن نستعيض عن الحدود المتضمنة $\cos^2$ بقيمها المتوسطة وهي 1/2 . وهذا يؤدي الى :

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) \qquad (16-104)$$

وهذا وفي حالة $k \gg 1$ ، يعني تقريبياً أن :

$$\sigma = 2\pi a^2 \qquad (16-105)$$

وبكلمات أخرى ، فإن المقطع العرضي لأجل الجسيمات عالية الطاقة يساوي ضعف المساحة الهندسية للدريئة . وكما ذكرنا سابقاً ينشأ العامل 2 بسبب إدخالنا تبعثر الظل .

لقد ناقشنا سابقاً في هذا الفصل المستويات الطاقية التقديرية والتبعثر الرنيني على نحو موجز . وقد رأينا أن الحالات التقديرية تنشأ حين يكون الكمون الفعال المشتمل على « كمون نابذ مركزي »، ومن نمط يسمح بأسر الجسيم الذي يملك طاقة موافقة للحالة التقديرية على مدار زمن طويل نسبياً قبل ان « يتسرب » هذا الجسيم الى خارج الكمون . وبما أن الكمون النابذ مركزياً يستطيع المساهمة بشكل حاسم في تكوين حالات كهذه ، فإن الحالة التقديرية توافق الحالة التي يكون فيها الزخم الزاوي للجسيم « المأسور » لانهائياً . وعموماً ، يتمخض المستوى التقديري عن انزياح طوري كبير لدى الموجة الجزئية المعنية ، وذلك حينما تتطابق طاقة الجسيم القاذف مع طاقة الحالة التقديرية . وفي هذه الحالة ، يقال عن الموجة الجزئية انها رنينية ، والموجة الرنينية جديرة بأن تتحكم في عملية التبعثر حين تكون الطاقة رنينية أو قريبة من الرنين . وكلما طال مكوث الجسيم في « الأسر » قبل تحرره ، كان المستوى

الطاقي مستدقاًأكثر . وكلما كان المستوى الطاقي مستدقاً أكثر ، قلّ اتساع طاقات الجسيم التي تكون رنينية فعلياً . وعلى نحو مماثل يبدو أن الانزياح الطوري في حالة الرنين أكبر لأجل المستوى الطاقي المستدق ، وذلك إذا ما قورن بمقداره في حالة المستوى الذي يكون عمر « الأسر » فيه قصيراً . ويبدو أن الانزياح الطوري في حالة الرنين يساوي تقريباً $\pm\frac{\pi}{2}$، وفي حالة كهذه يتخذ المقطع العرضي للتبعثر - كما سبق ورأينا - قيمته الأعظمية .

16–4 خلاصة .

تناول هذا الفصل التبعثر ابتداءً بمناقشة موجزة لمفاهيم فيزيائية مختلفة تتصل بالتبعثر . وتم إدخال فكرة المقطع العرضي للتبعثر وتعريف المقطعين العرضيّين ، التفاضلي والاجمالي . وجرى توصيف لنظام الاحداثيات المخبري ونظام مركز الكتلة وللرابط بينهما . ثم قدمنا توصيف عملية التبعثر في ميكانيك الكم بلغة الموجة المستوية الساقطة وموجة ما بعد التبعثر ، كما أوردنا تفسيراً لمختلف الحدود في تدفق الاحتمالية بالنسبة للموجة بعد التبعثر . وبينّا العلاقة بين المقطع العرضي للتبعثر والتبعية الزاويّة لدى الموجة بعد التبعثر كما ذكرنا بإيجاز تبعثر الظل والمستويات الطاقية التقديرية .

ولقد نوقشت طريقتان لمعالجة مسائل التبعثر : تقريب بورن وطريقة الأمواج الجزئية . وإن الطريقة الأولى أكثر قابلية للتطبيق عندما تكون الطاقة الحركية للحزمة الساقطة كبيرة ، وذلك بالمقارنة مع كمون التبعثر ، بينما يمكن تطبيق الطريقة الثانية بسهولة أكبر حين تكون طاقة الجسيمات الساقطة متدنية . وهكذا ، تميل كل من الطريقتين الى تكميل الأخرى . وتم استخدام بئر كمونية كروية ضحلة لأجل استعراض تقريب بورن ، كما عالجنا التبعثر من قبل كرة صلبة بطريقة الأمواج الجزئية . ثم ناقشنا بشكل موجز العلاقة بين المستويات الطاقية التقديرية والأمواج الجزئية الموافقة لها .

مسائل

16–1 استخلص التعبير التقريبي للمقطع العرضي للتبعثر الناجم عن بئر كمونية مربعة ، وذلك في حالة تعديل عمق الكمون بحيث يمكن إدخال مستوى طاقي جديد عندما $E = 0$ ، وافترض أن الجسيمات الساقطة متدنية الطاقة .

16–2 يساوي المقطع العرضي لأسر نيترونات طاقتها 0.1 الكترونا ـ فولطاً من قبل نواة معينة 2.5×10^{-18} سم². أوجد الحدّين الأعلى والأدنى للمقطع العرضي للتبعثر المرن .

16–3 بين أن المعادلات (16–62) و(16–63) المتعلقة بنهايات دالتي بسل ونيومان عادلة .

16–4 لتكن الموجة الكروية $\psi = Y_{lm}j_l(kr)$ انشر هذه الموجة بلغة الموجات المستوية واحسب معامِلات النشر $A(k)$.

$$Y_{lm}j_l(kr) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int A(k) \exp(ik \cdot r)\, dk$$

15–5 لماذا يقترن التبعثر غير المرن (أي التبعثر الذي يصحبه نقص في طاقات الجسيم المتعرضة للتبعثر) دائماً بشيء من التبعثر المرن ؟

16–6 استخدم تقريب بورن للحصول على المقطع العرضي التفاضلي لتبعثر جسيم لايملك برماً وطاقته E من قبل كمون على شكل $V(r) = A \exp(-br)$ و A و b ثابتان معطيان .

16–7 تناولنا في النص تبعثر الجسيمات عالية الطاقة من قبل حاجز كموني كروي . استخدم طريقة الأمواج الجزئية لحساب التبعثر في النهاية المتمثلة بالجسيمات ذات الطاقة المتدنية جداً .

16–8 (أ) استخدم نتائج المسألة (16–7) لتبيان أن الانزياح الطوري للموجة الجزئية $l = 0$ يمكن أن يكون °180 ، في ظل جهد مناسب عمقه V_0 عمق بئر كمونية مربعة نصف قطرها a)، في حين أن انزياح الأطوار ذات المراتب l الأعلى يكون ضئيلاً ، بحيث يمكن تجاهله بسبب تدني طاقة الجسيمات الساقطة . (ب) ماذا يحدث للمقطع العرضي للتبعثر في هذه الحالة ؟ لقد اكتشف رامساوير هذا التأثير أثناء تبعثر الكترونات متدنية الطاقة 0,7 الكتروناً ـ فولطاً من قبل ذرات الغازات النادرة .

(ج) علماً أن نصف قطر الذرة يساوي 10^{-8} سم ، ما هو عمق البئر الكمونية الفعالة لدى الهيليوم الذي يسمح بتفسير اكتشاف رامساوير ؟

16–9 (أ) ما هو المقطع العرضي الأعظمي للأسر بالنسبة لالكترونات حرارية طاقتها الموحدة 0,025 الكتروناً ـ فولطاً ؟ (ب) ما هو المقطع العرضي للتبعثر المرن الذي يرافق ذلك ؟

16–10 ادرس حالة التبعثر الذي تطرأ فيه انزياحات طورية مناسبة فقط على الموجتين الجزئيتين ℓ=o و ℓ=1 (أ) ناقش كيف تنعكس مساهمة الموجة ℓ=1 على المقطع العرضي الاجمالي . (ب) وكيف تنعكس على التوزيع الزاوي للجسيمات بعد تبعثرها ؟ (ج) أي نوع من القياسات يجب اجراؤه بقصد الحصول على القيمة الدقيقة لـ δ_o ؟ (د) وكذلك الأمر بالنسبة لـ δ_1 ؟ (هـ) كيف يمكن كشف الانزياح الطوري الصغير ℓ=2 ؟

16–11 بينّ أن المجموع الذي ورد ضمن المعادلة(16–103) يمكن تقديره بشكل مباشر (أي دون استبدال الحد بـ 1/2 لنحصل على :

$$\sum_{l=0}^{ka} (2l+1)\cos^2\left[ka - \frac{\pi}{2}(l+1)\right] = \tfrac{1}{2}(ka+1)ka + \tfrac{1}{2}ka\cos 2ka, \qquad ka \gg 1$$

لاحظ أن هذه النتيجة تبينّ عدم التغير الكبير في المقطع العرضي الإجمالي مع تغير K .

الفصل السابع عشر

الجسيمات المتطابقة

17-1 مؤثر تبديل الجسيم .

لقد ناقشنا في الفصل السادس معالجة النظم التي تتكون من أكثر من جسيم . لكننا افترضنا هناك أن جميع الجسيمات متمايزة أحدها عن الآخر . وسندرس في هذا الفصل كيف يؤثر في الشكلانية الافتراض بأن النظام المعني يتألف من جسيمات غير متمايزة . ونعني بـ « الجسيمات غير المتمايزة » أنه إذا جرى تبديل احداثيات الموضع والبرم بين جسيمين **فلا توجد طريقة فيزيائية لقياس حدوث ذلك التبديل في النظام** . وبالتالي ، فإن هذا التناظر إزاء تبديل جسيمين سوف يظهر في مكان ما ضمن الشكلانية .

يمكننا مقاربة المسألة المتعلقة بالتناظر الجسيمي وبتأثير تطابق الجسيمات بإدخال مؤثر تبديل الجسيم ، وهو يُعرَّف من خلال المعادلة :

$$P_{12}\psi(r_1, S_1; r_2, S_2) \equiv \psi(r_2, S_2; r_1, S_1) \qquad (17-1)$$

إن تأثير هذا المؤثر يكمن في تبديل الدلائل المرفقة بمتغيرات البرم والموضع ضمن الدالة الموجية للجسيمين 1 و 2 . (الدالة الموجية مكتوبة بمثابة دالة تابعة فقط لهذين الصنفين من المتغيرات ، ولكنها ـ بالاضافة إلى ذلك ، قد تكون دالة تابعة للاحداثيات التي تصف جسيمات أخرى) . وإذا كان هذان الجسيمان متطابقين فعلاً ، فمن الواضح أن مؤثر هاملتون يجب أن يكون متناظراً إزاء موضعي الجسيمين المتطابقين وبَرْمَيْهما . وبكلمات أخرى ، يجب أن لايحصل تغير في طاقة النظام إذا نحن أعدنا وسم الجسيمين حصراً : إذا سُمِّي الجسيم1 ما كان يُعرَف سابقاً على أنه الجسيم2 ، وسُمِّي الجسيم2 ما كان يُعرف فيما مضى الجسيم 1 ، فيجب أن تبقى طاقة النظام ، وبالتالي مؤثر هاملتون دون تغيير . وهكذا ، فإن مؤثر تبديل الجسيم

يبادل مؤثر هاملتون :

$$[P_{12}, H] = 0 \qquad (17-2)$$

وتكون معادلة القيمة المميزة لمؤثر التبديل هي :

$$P_{12}\psi = \alpha\psi \qquad (17-3)$$

ومن الواضح أن القيم المميزة تساوي :

$$\alpha = \pm 1 \qquad (17-4)$$

كما هو الحال بالنسبة لمؤثر التناظر (انظر الفقرة 5 − 10)، ولأن تطبيق مؤثر التبديل مرتين يعيد الجسيمات الى تشكيلها الأصلي ، ولذلك لايقوم بتغيير الدالة الموجية (إذ إن مربع القيمة المميزة يجب أن يساوي الواحد).

وبما أن مؤثر التبادل يبادل مؤثر هاملتون ، فبوسعنا اختيار الدالات المميزة لتكون دالات مميزة مشتركة للمؤثرين كليهما . وبالتالي ، يمكن وسم الحالات الطاقية للنظام الميكانيكي بأنها إما شفعية أو وترية بالنسبة الى تبديل الجسيمات . وطالما أن علاقة التبادل (2−17) سارية على مؤثر هاملتون أياً كان ، مضطرباً أم غير مضطرب ؛ فمن الواضح أن مقدار التغير في مؤثر التبديل ـ أو التناظر ـ يساوي الصفر :

$$\frac{d}{dt}\left\langle P_{12}\right\rangle = 0 \qquad (17-5)$$

وعليه ، فإن الجسيمين الواقعين في الحالة التي تكون القيمة المميزة للتبديل فيها تساوي 1+ فسوف يبقيان في تلك الحالة طوال الفترة الزمنية ، إذ إنه لاتوجد مفاعلة تستطيع أن تؤدي بالجسيمين الى حالة أخرى . وإن خاصية الشفعية أو الوترية هذه إزاء مؤثر التناظر هي ـ بالتالي ـ خاصية دائمة تماماً ، ويمكن دراستها كخاصية مثبّتة لدى الجسيمات بحد ذاتها وليس لدى مختلف الحالات الممكنة التي قد تشغلها الجسيمات .

يقال عن تلك الجسيمات التي تتخذ القيمة المميزة(3−17) بالنسبة لها المقدار 1+ إنها تخضع **لاحصائيات بوزيه ـ اينشتاين** ، بينما يقال عن الجسيمات في حالة القيمة 1−، إنها تخضع **لاحصائيات فيرمي ـ ديراك** . ومعروف الى الآن أن جميع الجسيمات (أو الكمات) التي تملك برماً مساوياً عدداً صحيحاً (أو الصفر) تخضع لاحصائيات بوزيه ، وكل الجسيمات ذات البرم المساوي نصف عدد صحيح تخضع

لاحصائيات فيرمي . والفوتونات التي تملك برماً فعالاً يساوي 1 تخضع لاحصائيات بوزيه .

17-2 مبدأ باولي .

إن طابع الاحصائيات التي تخضع لها الجسيمات تنعكس بشكل محدد جداً في حركتها . ويمكن رؤية ذلك مثلاً بدراسة الدالة الموجية لجسيمين يخضعان لاحصائيات فيرمي . ولندرس إمكان أن يستطيع جسيمان متطابقان شغل النقطة نفسها في الفراغ وامتلاك القيمة نفسها لأجل المركبة z من زخم البرم الزاوي . وواضح من تأثير مؤثر التبديل في دالة كهذه وضمن الشروط المذكورة ، أن الدالة يجب أن تكون صفراً :

$$P_{12}\psi(r_1, S_1; r_2, S_2) = \psi(r_2, S_2; r_1, S_1)$$
$$= -\psi(r_1, S_1; r_2, S_2) \qquad = 0$$

$$\begin{cases} r_1 = r_2, \\ S_1 = S_2. \end{cases} \quad \text{عندما} \qquad (17-6)$$

ويعني تلاشي الدالة الموجية ضمن هذه الشروط أن احتمالية شغل الجسيمين للنقطة نفسها في الفراغ وامتلاكهما لاتجاه البرم نفسه تساوي الصفر . والمعادلة (17-6) هي أحد الأشكال التي يمكن أن يظهر بها المبدأ الفيزيائي المعروف **بمبدأ استبعاد باولي** . ولقد جرت تاريخياً صياغة هذا المبدأ لأول مرة هكذا : **لايمكن لجسيمين يخضعان لاحصائيات فيرمي أن يوجدا في الحالة الكماتية نفسها** . ونستطيع أن نرى صحة ذلك من خلال دراسة جسيمين يخضعان لاحصاء فيرمي (فيرميونَين)، ويتحركان في مجال قوى عادي . فإذا نحن تجاهلنا المفاعلة بين الجسيمين ، نستطيع كتابة الدالة الموجية لأجل الحالة المستقرة بالشكل التالي :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_1(r_1, S_1)u_2(r_2, S_2) - u_1(r_2, S_2)u_2(r_1, S_1)\right] \qquad (17-7)$$

حيث u_1 و u_2 تشيران الى الحالة المستقرة لكل من الجسيمين على حدة في مجال القوة المعني (انظر مناقشة المعادلة(115-6) وتلبي الدالة الموجية (17-7) المعادلة التالية :

$$P_{12}\psi = -\psi \qquad (17-8)$$

ولقد أضفي عليها تناظر يجعلها وترية بالنسبة الى مؤثر التبديل . ويجب أن

نلاحظ أن الدالة الموجية تتلاشى تماماً إذا كانت الدالتان u_1 و u_2 متطابقتين. والطريقة الأكثر فيزيائية، والتي يمكن بها قول ذلك، هي أن الجسيمين لايستطيعان التواجد في حالة تقتضي حركتهما على المدار نفسه وبرماهما متوازيان. ولذا، يمكن أن يوجد هنالك فقط الكترونان على كل «مدار» ذري محدد، ويتوجب عليهما امتلاك برمين متعاكسين في الاتجاه. وتساعد هذه الصياغة لمبدأ باولي على تفسير النظام الدوري للعناصر.

يقدم مبدأ باولي أيضاً تفسيراً للسمات الرئيسية للطيف الضوئي لدى المعادن القلوية. ولنأخذ مثلاً المستويات الطاقوية للبوتاسيوم، وهي مبينة في الشكل (1−17). فللبوتاسيوم تسعة عشر الكتروناً، وسوف تناقش الدالة الموجية للحالة الدنيا في البداية وفقاً لتقريب فجٍّ يتم خلاله تجاهل المفاعلات من نمط الكترون ـ الكترون، ولكن تأثيرات التناظر ستوضع في الحسبان. وضمن هذا التقريب، سوف يقوم الكترونان بَرماهما متعاكسان بشغل الحالة شبه الهيدروجينية 1S، وسوف تشغل ثمانية الكترونيات القشرة (n=2) وسيكون الكترونان (متعاكسان) في الحالة 2S، وستشغل ستة الكترونات 2P (ضمن ثلاثة أزواج موافقة للقيم الثلاث الممكنة بالنسبة لـ m_l)، أما الالكترونات التسعة المتبقية فسوف تشغل الحالات S و P و D في القشرة $n=3$.

في الواقع، ليس الأمر على هذا النحو من البساطة، إذ يتوجب أخذ المفاعلات بين الالكترونات بالحسبان، فالالكترونات الداخلية، ذات الترابط الوثيق فيما بينها، ضمن القشرتين (n=1) و (n=2) والتي تدور على مقربة بالغة من النواة، تميل إلى تحييد الشحنة النووية الموجبة التي تتأثر بها الالكترونات الخارجية. ولكن الالكترونات S الخارجية ـ وبقدر أقل الالكترونات P و D ـ تميل الى اختراق هذه الشحنة الحجمية الالكترونية. لهذا، فإن الشحنة الفعالة للنواة الموجبة هي أكبر بالنسبة للحالات $3S$ مقارنةً بالحالات $3P$، والشحنة الفعالة المؤثرة في الكترونات الحالة $3D$ هي أصغر أيضاً. وهكذا، تقع الحالات $3S$، ومن حيث الطاقة، تحت الحالات $3P$، وهذه بدورها تقع تحت الحالات $3D$. لهذا، نجد أن الالكترونات الثمانية، وأثناء ملء القشرة $(n = 3)$، تندرج ضمن الحالات $3S$ و $3P$، بينما لايندرج الالكترون الأخير (الكترون التكافؤ) ضمن القشرة $3D$، بل ضمن الحالة $4S$، وذلك لأن تأثير الاختراق المداري يكفي

لجعل الحالة $4S$ أدنى من الحالات $3D$.

إن المستويات الطاقية التي تلعب دوراً في علم الطيف الضوئي توافق **جميعها** تغيّر الحالة لدى الكترون التكافؤ. ومن الأفضل دراسة حركة الكترون التكافؤ في البداية من مواقع تقريب آخر بسيط. ولنفترض أن جميع الالكترونات، ما عدا الكترون التكافؤ، مجتذَبة الى قرب النواة بطريقة تختزل شحنتها الفعالة الى $Z = 1$.

الشكل **1-17**. نظام المستويات الطاقوية لدى البوتاسيوم لأجل حالات الالكترون الخارجي (الكترون التكافؤ). وذلك بفرض أن الالكترونات الداخلية الثمانية عشرة تقع على مداراتها الذرية الطبيعية. ويظهر الترميز الطيفي للمستويات الطاقية في الأعلى. ويبدو على اليسار ولأجل المقارنة - طيف الهيدروجين، وذلك بما يتفق مع قيم العدد الكمي الرئيسي **n**.

عندئذٍ ، يتحرك الكترون التكافؤ على المدارات الهيدروجينية $3D$, $4S$, $3P$, $4D$، الخ . فكلما كان المدار أكبرَ و أقل اختراقاً ، كان التقريب أفضل . وهكذا ، كلما كان n ، ℓ أكبر ، تكون الطاقات موافقة ، وعلى نحو تقريبي ، للقيم الموافقة لدى الهيدروجين ، بينما يؤدي تأثير الاختراق المداري الى جعل الحالة $4S$ تقع تحت الحالة $3D$. ولكن المستويات $4S$, $4P$, $4D$ ، تشكل أسرة واحدة (انظر الشكل (17-1) ، كما أن المستويات $5S$, $5P$, $5D$, $5F$ ، تشكل أسرة أخرى مشابهة ، وذلك على هيئة متتالية نظامية حدها الأدنى الحالة S. لاحظ مواضع هذه الأسر بالنسبة للحالة الهيدروجينية الموافقة ، وذلك كما هو مبين في الشكل(1 - 17)

17-3 مؤثر هاملتون غير التابع للبرم .

يمكن تبسيط مناقشتنا لتأثير التناظر الجسيمي في حالة النظام بعض الشيء اذا استطعنا افتراض أن مؤثر هاملتون غير تابع لزخوم برم الجسيمات . فضمن هذا الشرط تكون مؤثرات البرم الخاص بمختلف الجسيمات متبادلة مع مؤثر هاملتون :

$$[S_j, H] = 0 \qquad (17-9)$$

ومن الملائم أحياناً إدخال مؤثر تبديل برم الجسيمS_{12} ، الذي يؤثر فقط في الاحداثيات البرمية للجسيمات . فبالنسبة لجسيمين ، نجد أن مؤثرات المركبة Z من زخوم البرم الزاوي للجسيمات المنفردة تبادل مؤثر هاملتون ، ولكنها لاتبادل مؤثري التبديل P_{12} و S_{12} طالما أن تأثير P_{12} أو S_{12} على S_{12} سيتجلى في تبديل 1إلى 2 . لهذا لن يكون هذا المؤثران ضمن مؤثر هاملتون مؤثرين تبادليين ملائمين لتوصيف حالات تناظر محدد . ومن ناحيةُ أخرى ، تبادل المركبة Z من زخم البرم الزاوي الاجمالي لدى الجسيم مؤثر هاملتون إضافةً لمؤثرات التبديل ، وذلك كون متناظراً إزاء الدليلين 1 و 2 :

$$S_z = S_{1z} + S_{2z} \qquad (17-10)$$

يكون مربع زخم البرم الزاوي الاجمالي متناظراً ايضاً إزاء الدليلين 1 و 2 ، إضافة الى أنه يبادل مؤثر هاملتون ومؤثرات التبديل ، وهذا ما يمكن رؤيته من العلاقة :

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 \qquad (17-11)$$

وعليه ، تشكل المؤثرات الخمسة S^2, S_z, H, P_{12}, S_2 جملةً من المؤثرات المتبادلة ، وضمن هذا التقريب يمكن توصيف الحالات الطاقية لأي نظام يتألف من جسيمين (متطابقين) بوساطة الأعداد الكمية الخاصة بزخم البرم الزاوي الاجمالي وبالمركبة z من زخم البرم الزاوي الاجمالي وبالطاقة وبالتناظر الجسيمي (الاجمالي) وبتناظر البرم .

سنستخلص فيما يلي شكل الدالات الموجية التي تشكل دالات مميزة لـ S^2 و S_z مفترضين أن الجسيمين يخضعان لاحصائيات فيرمي ببرم يساوي $\frac{1}{2}$. وإن الشكلانية ، التي على هذا النحو ، تنطبق على الالكترونات ، كما أنها تنطبق على البروتونات والنيترونات ، فجميعها جسيمات برمها $\frac{1}{2}$ وتخضع لاحصائيات فيرمي . وبامكان جسيمين ، يساوي برم كل منهما $\frac{1}{2}$ ، أن يمتلكا برمين متوازيين ، مما يجعل زخمها الزاوي الاجمالي مساوياً لـ $\hbar$ باتجاه موازٍ للبرم ، أو أن يمتلكا برمين متعاكسين ، وفي هذه الحالة يُفني الزخمان الزاويّان أحدهما الآخر ، مما يسفر عن برم اجمالي للنظام مساوٍ الصفر . أما الدالة الموجية فسوف تتوصف بدليلين يشيران الى اتجاه محور البرم لدى كل من الجسيمين بالنسبة للمحور z .

عندئذٍ ، سوف تكتب الدالة الموجية مثلاً على الشكل التالي :

$$\psi = \psi_{+-} \qquad (17-12)$$

حيث يشير الدليل $(+)$ الى أن الجسيم الأول يملك برماً موجهاً في الاتجاه z الموجب ويشير الدليل $(-)$ الى أن برم الجسيم الثاني موجه في الاتجاه z السالب . وهناك أربع حالات متباينة ممكنة للبرم ، وهي توصف بأربعة تراكيب مختلفة ممكنة بالنسبة للدليلين : $(+\,+)$، $(+\,-)$، $(-\,+)$، $(-\,-)$. ويجب أن نتوقع أربع حالات برمية مستقلة ، إذ إن هناك ثلاثة توجهات ممكنة لأجل حالة الثلاثي الالكتروني ذي البرم الاجمالي المساوي 1 ، في حين يوجد اتجاه واحد للحالة الوحيدة ذات البرم المساوي الصفر ، مما يقود أيضاً الى عدد اجمالي من الحالات المستقلة الممكنة يساوي الأربع .

بوسعنا حساب الدالات الموجية التي تشكل دالات مميزة لـ S^2 و S_z، وذلك بلغة دالات من النمط(17−12). فالدالة $(+\,+)$، والتي توافق امتلاك الجسيمين كليهما لبرم موجه ضمن الاتجاه z الموجب ، هي أيضاً دالة مميزة لـ S^2 و S_z ، كما يمكننا أن نرى ، ومن خلال تطبيق هذين المؤثرين ، أن :

$$S^2\psi_{++} = 2\hbar^2\psi_{++},$$
$$S_z\psi_{++} = \hbar\psi_{++} \qquad (17-13)$$

وهذه الدالة الموجية (+ +) هي الأولى في سلسلة ثلاث دالات تتميز بأن العدد الكمي للبرم الاجمالي يساوي $S = 1$ ، بينما يمكن توليد الثانية و الثالثة من خلال تطبيق مؤثر المرقاة $S_- = S_x - iS_y$:

$$S_- = S_{1-} + S_{2-} \qquad (17-14)$$

وعند التأثير في الدالة الموجية(12−17) ، تسفر كل من مركبتي هذا المؤثر عن نتيجة من النوع التالي :

$$S_{1-}\psi_{m_{s1}m_{s2}} = [(s_1 + m_{s1})(s_1 - m_{s1} + 1)]^{1/2}\hbar\psi_{m_{s1}-1,m_{s2}} \qquad (17-15)$$

وهذا ما ينتج بشكل مباشر عن المعادلة (59-9). وبالاستفادة من هذه المعادلة عند تطبيق المؤثر S_1 على الحالة (+ +) نجد أن :

$$S_{1-}\psi_{++} = \hbar\psi_{-+} \qquad (17-16)$$

وبالنسبة لمؤثر المرقاة ، الاجمالي (14−17)، نجد أن :

$$S_-\psi_{++} = \hbar(\psi_{-+} + \psi_{+-}) = \sqrt{2}\hbar\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\psi_{+-} + \psi_{-+}) \qquad (17-17)$$

ان المعادلة الثانية مكتوبة بطريقة تؤكد على تعبير الدالة الموجية . ويعطي تطبيق المؤثر $-\ S^2$ على الدالة الأصلية العلاقة التالية :

$$S_-^2\psi_{++} = 2\hbar^2\psi_{--} \qquad (17-18)$$

ومن خلال إدخالنا لجملة أخرى من الدلائل لأجل الدالات الموجية الموسومة بالقيم المميزة S و m_s ، نستطيع أن ،نكتب :

$$\psi_{++} \equiv \psi_{11} = \psi_{s=1,m_s=1} \qquad (17-19)$$

يمكن اختيار الأعداد الكمية لأجل هذه الدالة المعينة ، بحيث تكون تلك الأعداد هي المركبتان z من برمي الجسيمين ، كلاً على حدة ، أو زخم البرم الزاوي الاجمالي والمركبة z من الزخم المذكور ، فالجسيمان متطابقان بالنسبة لكل من جملتي الأعداد الكمية . وعندئذٍ ، تسفر المعادلة(14−17) وعند تطبيقها على الحالة العامة m_s و ψ_s ، عن :

$$S_-\psi_{s,m_s} = [(s+m_s)(s-m_s+1)]^{1/2}\hbar\psi_{s,m_s-1} \qquad (17-20)$$

ويؤدي تطبيق هذه العلاقة على الدالة الموجية الأولى في السلسلة ، أي على المعادلة (17−19) الى :

$$S_-\psi_{11} = \sqrt{2}\hbar\psi_{10} \qquad (17-21)$$

وبمقارنة هذه النتيجة مع المعادلة (17 − 17) نجد أن :

$$\psi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{+-} + \psi_{-+}) \qquad (17-22)$$

مما يشكل نشراً للدالة الموجية ذات العددين الكميَّين m_s و S ، وذلك بلغة الدالات الموجية الموسومة بالعدد الكمي m_s لكل من الجسيمين . وهذا مثال بسيط على تحويل التمثيلات ، ولقد تمت مناقشته في الفصل الثالث عشر . وعلى نحو مماثل ، يؤدي المؤثر S_- مرةً أخرى الى :

$$\psi_{1,-1} = \psi_{--} \qquad (17-23)$$

وبما أن الدالة الموجية وفي ظل زخم البرم الزاوي الاجمالي المساوي الصفر . يجب أن تكون معامدة للدالات الأخرى التي توافق زخم البرم الزاوي المساوي 1، وأن تكون ـ وعلى وجه التخصيص ـ معامدة للدالة ψ_{10} ، وعندها يجب أن تتخذ هذه الدالة الشكل التالي :

$$\psi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{+-} - \psi_{-+}) \qquad (17-24)$$

ومن الواضح أن هذه الدالة تصف الحالة التي يكون زخم البرم الزاوي الاجمالي فيها موجهاً في الاتجاه z ، وتكون متعامدة مع الدالات $\psi_{1,-1}$ ، ψ_{11}, ψ_{10} .

ويتوجب ابداء ملاحظة حول المصطلحات . فعندما يكون الكترونان أو جسيمان آخران برمهما $\frac{1}{2}$ يملكان برمين متعاكسين يقال إنهما في حالة **أحادية** ، وعندما يكونان في حالة يتوازى فيها البرمان ، يقال إنهما في حالة **ثلاثية** .

17-4 تأثير التناظر البرمي في طاقة حالة ما :

إن مؤثر تبديل البرم S_{12} هو مؤثر من النمط المعطى في المعادلة (17-1) عدا عن أنه يؤثر فقط في دلائل المتغيرات البرمية في الدالة الموجية . وبالتالي ، فإن مؤثر تبديل البرم ، وعند تطبيقه على دالة موجية من النمط (17-12)، يتجلى تأثيره في تبديل الدليلين الأول والثاني للدالة الموجية . أما إذا طُبِّق هذا المؤثر على أي من الدالات(17-19) أو(17-22)أو(17-23)، فاننا نستطيع أن نرى بالتمحيص أن الدالة تبقى دون تغيير . وعليه ، فإن الحالات الثلاثية متناظرة إزاء مؤثر تبديل الزخم . و من ناحية أخرى ، وعندما نطبق مؤثر تبديل البرم على المعادلة(17-24) ، تتغير إشارة الدالة ، مما يعني أن الحالة الأحادية وترية إزاء تبديل البرم .

ولنفترض مرةً أخرى أن النظام المعني يتكون من فيرميونَيْن ، وأن مؤثر البرم الاجمالي S^2 والمركَّبة z من البرم الاجمالي S_z ومؤثر هاملتون ومؤثر التبديل ، جميعها تتبادل فيما بينها ، وأنه يجب اختيار الدالات الموجية لتكون دالات مميزة لكل هذه المؤثرات . وبالتالي ، فإن الشكل العام للدالة الموجية هو :

$$\psi_{nsm_s} = u_{ns}(r_1, r_2)v_{sm_s} \qquad (17-25)$$

حيث تكمن التبعية الفراغية لهذه الدالة فقط في الحد الأول من الطرف الأيمن ، بينما تنحصر التبعية البرمية في الحد الثاني . وبما أن مؤثر هاملتون غير تابع لتوجهات البرم لدى الجُسيمين ، فمن الممكن دائماً فصل الدالة البرمية على هذا النحو . وبكلماتٍ أخرى ، يجب أن يكون الجزء المتضمِن للموضع ، أي الحد الأول في المعادلة (25-17)، غير تابع للبرم . ولكن هذا الأمر ليس صحيحاً تماماً ، فالدالة الاجمالية ψ_{nsm_s} يجب أن تكون متعاكسة التناظر إزاء تبديل برمَيْ الجُسَيمَيْن وموضعيهما ، وبنتيجة ذلك ، تظهر تأثيرات هامة للتبعية البرمية .

لقد رأينا سابقاً ، أن الدالة البرمية v_{sm_s} متناظرة إذا كان البرمان متوازيَيْن ؛ ومتعاكسة التناظر إذا كان البرمان متعاكسَيْن ، أي أنها متناظرة إزاء تبديل البرم عندما $s = 1$ ، ومتعاكسة التناظر عندما العدد الكمي $s = 0$. أما الجزء الموضعي من الدالة $u_{ns}(r_1, r_2)$ فمتعاكس التناظر أوْ متناظر ، وذلك تبعاً لكون الحد الثاني متناظراً أو متعاكس التناظر : إذا كانت الدالة البرمية متناظرة إزاء تبديل البرم ، فإن الجزء الموضعي من الدالة الموجية يجب أن يكون متعاكس التناظر ،

وذلك كي تكون الدالة بمجملها متناظرة إزاء تبديل الاحداثيات البرمية والموضعية .
ولهذا السبب ، يُوسَم الحد $u_{ns}(r_1, r_2)$ بالدليلين n و s كليهما ،
وتتوقف طاقة النظام على العدد الكمي البرمي s ، على الرغم من استقلالية مؤثر هاملتون أزاء المتغيرات البرمية . ويصبح هذا التأثير ، التناقضي نوعاً ما ، ممكناً فقط بسبب خواص التناظر .

سنرى ، وباختصار ، أنه يمكن لتأثيرات التناظر أن تكون كبيرة تماماً ؛ فمثلاً : المستويات الطاقية في ذرة الهيليوم ، والتي يتوازى فيها البرمان ، تختلف تماماً عنها في الذرة التي يكون البرمان فيها متعاكسين . ويمكن أن نرى التأثير الطارىء على طاقة النظام نتيجةً لخواص التناظر إزاء تبديل موضعَي الجسيمين ، فإنه سوف تتلاشى الدالة كلما شغل الجسيمان الموضع نفسه . وبكلماتٍ أخرى ، سوف يتحرك الجسيمان بطريقة تجعلهما يميلان الى البقاء بعيداً أحدهما عن الآخر . ومن الجهة الأخرى ، وعندما تكون الدالة u متناظرة ، يميل الجسيمان الى وجودهما الواحد قرب الآخر .
وبما أن هناك قوةَ تدافعٍ كهرساكنة بين الالكترونين ، فإنه يجدر بنا توقُّع أن تكون الحالات المتناظرة حالاتٍ ذات طاقة أعلى من الحالات التي تكون الدالة الموجية فيها متعاكسة التناظر إزاء تبديل الموضع .

ولكي نمتحن هذه الأفكار على نحو أوثق ، سنأخذ مثالاً حالة ذرة الهيليوم المذكورة أعلاه . فاذا تجاهلنا الحدود الموافقة للترابط البرمي المداري وللمفاعلة البرمية ـ البرمية بين الالكترونين ، فاننا نستطيع كتابة مؤثر هاملتون لأجل ذرة الهيليوم وكأن الأخيرة تتألف من نظام من جسيمين ، حيث :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathrm{P}_1^2 + \mathrm{P}_2^2\right) - \left(\frac{2e^2}{r_1} + \frac{2e^2}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (17-26)$$

وبمثابة تقريب أولي شديد الفجاجة يمكننا تجاهل المفاعلة بين الالكنرونين ، حيث يمثل الحد الأخير المفاعلة في هذه المعادلة ، وفي هذه الحالة سوف تُوسَم المستويات الطاقية بعددَيْن كميَّين يوافق كل منهما الكتروناً بمفرده ، مما يسمح بكتابة الطاقة على النحو التالي :

$$E_{n_1,n_2} = -2mc^2\alpha^2\left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (17-27)$$

هذا ، ويمكن استخلاص الدالة الموجية من جداءات الدالتين الموجيتين

الكولوميتين (الهيدروجينيتين) للالكترونين المنفردين .

إن منظومة الأعداد الكمية ، والتي تشير الى الحالات الطاقية للنظام ضمن هذا التقريب ، هي : $n_1, n_2; l_1, l_2; m_{l1}, m_{l2}; m_{s1}, m_{s2}$. ولكن هذه الأعداد ليست ملائمة إذا أحيلت الدالة الموجية على صيغة التناظر على النحو التام .

ويجب أن نلاحظ أن مؤثر هاملتون (26−17) لايحتوي على مؤثرات البرم . ولهذا ، وكما ورد في النقاش أعلاه ، يمكننا دائماً اختيار الحالات ذات التناظر التام ، بحيث تكون جداءً لدالات منفصلة ، فراغية وبرمية . وتكون الدالات البرمية والفراغية ، وعلى انفراد ، متناظرة أو متعاكسة التناظر ، إزاء تبديل الجسيم . وكما رأينا سابقاً ، تكون واحدةً فقط من الدالات البرمية الأربع لنظام الكترونين ، متعاكسة التناظر ، وتلك هي دالة الحالة الأحادية ، والتي يكون زخم البرم الاجمالي فيها صفراً . وبالتالي ، يتوجب على الجزء الفراغي من هذه الدالة الموجية أن يكون متناظراً . وبطريقة مماثلة ، نجد أن الحالات ثلاثية البرم الثلاث هي متناظرة ، والأجزاء الفراغية الموافقة لها يجب أن تكون متعاكسة التناظر .

لايتبادل مؤثر تبديل الجسيم مع مؤثري زخم البرم الزاوي المداري الاجمالي كلاً على انفراد ، وكذلك نجد أنه في حين لايتبادل مؤثرا الزخم الزاوي المداري لكل من الجسيمين مع الحد الأخير من مؤثر هاملتون (26−17) ، فإن المؤثر الاجمالي L يتبادل معه . وتشكل المؤثرات H وP_{12} وL^2 وS^2 و L_z وS_z (حيث $L^2=(L_1 + L_2)^2$ و$S^2=(S_1 + S_2)^2$) جملة متبادِلة . ويمكن تقسيم الدالات المميزة المشتركة لها الى صنفين يوافقان الحالات الأحادية والثلاثية . واذا أسقطنا الحد الترابطي e^2 / r_{12} من مؤثر هاملتون ، فستكون تلك الدالات المميزة كالآتي :

$$\psi_{1nlsm_lm_s} = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_{100}(1)u_{nlm_l}(2) \pm u_{100}(2)u_{nlm_l}(1)]\rho_{sm_s} \quad (17-28)$$

حيث تشير الدلائل إلى الأعداد الكمية n_1 وn_2 و ℓ وS وm_ℓ وm_s لأجل النظام الاجمالي وإلى الأعداد n, ℓ, m_ℓ لأجل حالات الالكترون المنفرد . وبهدف التبسيط افترضنا أن أحد الالكترونين يقع في الحالة الدنيا للهيدروجين ، حيث $n = 1$ ، وتشير الدالات $U_{n\ell m_\ell}$ إلى الدالات الموجية للهيدروجين ، بينما تدل الاشارة الموجبة على الحالة الأحادية $S = O$ وتوافق الاشارة السالبة الحالات الثلاثية $S = 1$.

ومن الجليّ أنه ، ولأجل n و ℓ وm_ℓ معطاة ، تكون الحالات البرمية الأربع (الأحادية والثلاثية) مفككة .

باستطاعتنا إدخال الحد الترابطي e^2/r_{12} بمثابة اضطراب من المرتبة الأولى .
وعلى الرغم من أن الحالات الطاقية غير المضطربة مفككة ، فإن مصفوفة الاضطراب تكون قطرية بشكل مسبق ضمن التمثيل الذي تم اختياره . وتكون العناصر المصفوفية (القطرية) ، ولأجل e^2/r_{12} ، هي :

$$\left(1nlsm_l m_s \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| 1nlsm_l m_s\right) \equiv A \pm B \qquad (17-29)$$

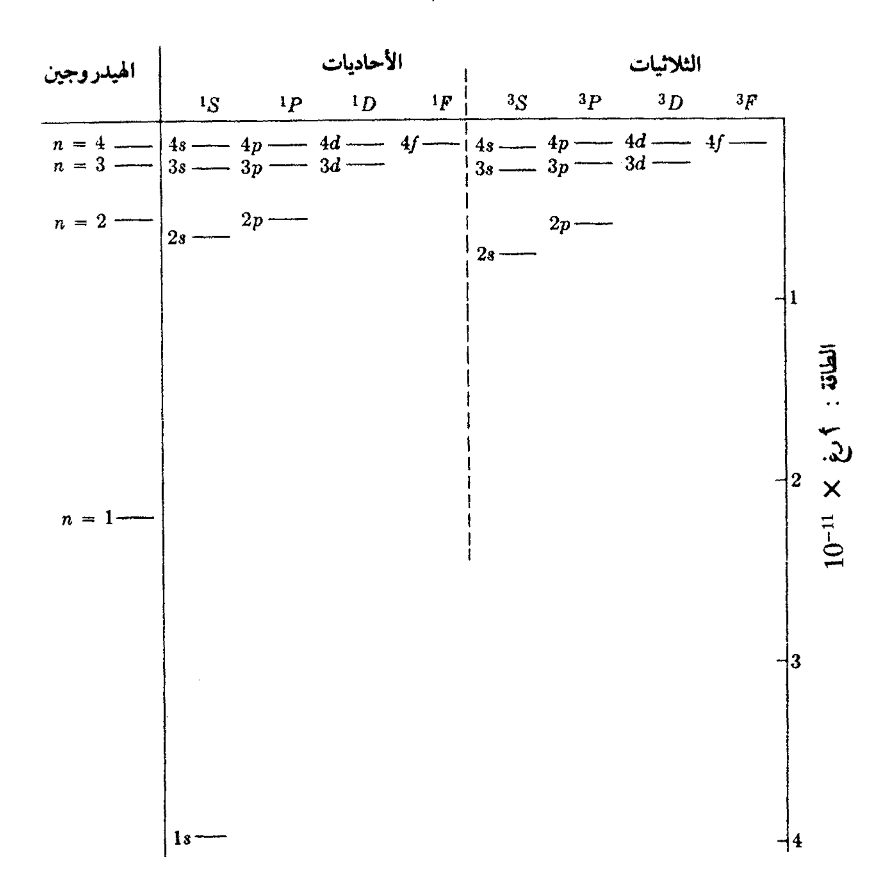
حيث : $A-$ طاقة مفاعَلة الحجب و $B-$ طاقة مفاعَلة التبادل :

$$\begin{aligned} A &\equiv \left(u_{100}(1)u_{nlm_l}(2), \frac{e^2}{r_{12}}\, u_{100}(1)u_{nlm_l}(2)\right), \\ B &\equiv \left(u_{100}(1)u_{nlm_l}(2), \frac{e^2}{r_{12}}\, u_{100}(2)u_{nlm_l}(1)\right) \end{aligned} \qquad (17-30)$$

حيث تكون طاقة التبادل موجبة عادةً ، وبالنتيجة تكون الحالات الأحادية ذات طاقة أعلى مقارنةً مع الحالات الثلاثية .

تكون طاقة مفاعلة الحجب في الواقع كبيرة جداً بالنسبة لحسابات المرتبة الأولى من الاضطراب ، وهذا أمر ذو مدلول بالغ . ولكن إجراء معالجة دقيقة بغير الطريقة الاضطرابية تبين أن الأعداد الكمية ℓ وm_ℓ وS و m_s تبقى صالحة ، وذلك لأن حد المفاعلة يبادل المؤثرات الموافقة لها . (وهذه طريقة أخرى تماماً للتأكد من أن مصفوفة المفاعلة في هذا التمثيل قطرية).

يبيِّن الشكل(17-2) المستويات الطاقوية التي تُلاحَظ تجريبياً لدى الهيليوم ، وذلك بالمقارنة مع المستويات الموافقة في حالة الكترون واحد ، وعندما $Z = 1$. وقد افترضنا أن مستويات الهيليوم إما أحادية أو ثلاثية ، وهذا ما يشار اليه على نحو اعتيادي بوســـــــاطة دليــــــل كبير ملحق بترميز الحدود ، وذلك كما هو مبينٌ في الشكل . ويجب أن نلاحظ أنه ـ ولأجل كل مستوى أحادي ، ماعدا المستوى الأدنى ـ توجد مجموعة من المستويات الثلاثية التي تملك الطاقة نفسها تقريباً . ولايمكن أن توجد حالة ثلاثية موافقة للمستوى الأحادي الأدنى بحكم مبدأ باولي ، إذ إن الالكترونين في هذه الحالة لهما الدالة الموجية المدارية نفسها .



الشكل 2-17. المستويات الطاقوية للهيليوم، حيث تم تقسيم النظام إلى جملتين من الحدود بما يوافق الهيليوم الأحادي والهيليوم الثلاثي. وتظهر المستويات الطاقية للهيدروجين في الجانب الأيسر.

ويجب أن نلاحظ أيضاً أن المستويات الطاقية الثلاثية تقع أدنى من الحالات الطاقية الأحادية المعنية بعض الشيء . وحين يكون الالكترونان في حالة برمية ثلاثية

ـ وهي الحالة المتناظرة إزاء تبديل البرم ـ فإن الجزء الموضعي من الدالة الموجية متعاكس التناظر إزاء تبديل الجسيم . وبالتالي ، يتجنب الالكترونان أحدهما الآخر كما سبق النقاش ، وذلك عندما يكونان في الحالة الثلاثية . وبما أن هذين الالكترونين يتجنب أحدهما الآخر ، فإن طاقة التنافر بينهما تكون ، وبشكل وسطي ، أقل منها حين يكونان في الحالة الأحادية ، وهذه المساهمة الموجبة في الطاقة أصغر في الحالة الثلاثية مما هي عليه في الحالة الأحادية . **وهذا ما يجعل الحالات الطاقية الأحادية تقع فوق الحالات الطاقية الثلاثية الموافقة لها** . والموقف هنا مشابه جداً لذلك الذي يجب توقُّعه فيما إذا كان الزخمان المغنطيسيان للالكترونين يتفاعلان بطريقة تخفض من طاقتهما حين يكون الالكترونان متعاكسيَ التناظر ، وترفع من تلك الطاقة حين يكون برما الالكترونين متوازيين . ولكن ، وكما سبق أن أشرنا ، ليس بوسع هذا التأثير الطاقوي أن يفعل شيئاً مع المجالات المغنطيسية ، بل إنه ينشأ فقط عن المفاعلة الكهرساكنة بين الالكترونين .

لابد من ملاحظة الكثير من الأمور الأخرى ، وذلك فيما يتعلق بمواضع النظام ومستوياته الطاقوية . وقبل كل شيء ، تقع الحالة الدنيا على مستوى أدنى بكثير من المستويات الطاقوية الأخرى . وهذا ما يمكن توقُّعه ، وذلك لأن الالكترونين كليهما ، وعلى المدار الداخلي الأقصى ، يخضعان لمفاعلة شديدة من قبل النواة . ولكن ، وفي جميع الحالات الطاقوية الأخرى ، يوجد أحد الالكترونين على مدار أعلى (مدار شبه هيدروجيني تقريباً)، ويقع في موقع بعيد جداً خارج الموقع الذي يمكن أن يشغله الالكترون الآخر (الداخلي). وبالتالي ، فإن الالكترون الداخلي الأقصى يتحرك على مدار شبه هيدروجيني تقريباً ، وفي مجال نواة الهيليوم ثنائية الشحنة . هذا بينما يتحرك الالكترون الخارجي الواقع في حالة أعلى مهيَّجة على مدار شبه هيدروجيني ، حيث إن إحدى شحنتي النواة تكون ، وبالنسبة له ، قد حُيِّدَت ، وذلك من قبل الالكترون الداخلي . وضمن هذا التقريب ، نستطيع عدَّ الالكترون الداخلي مرتبطاً ، وبشكل وثيق ، مع النواة ، بينما يشهد الالكترون الأضعف ارتباطاً يشبه نواةً وحيدة الشحنة . وهذا يعني أن الحالات العليا المهيَّجة لدى ذرة الهيليوم يجب أن تطابق تقريباً حالات الالكترون الذي يتحرك في مجال نواة وحيدة الشحنة . وكما ذكرنا ، يُبيِّن الشكل (2–17) المستويات الطاقية للهيدروجين . وإنه لواضح أن مستويات الهيليوم للحالات المهيَّجة توافق ، وعلى نحو وثيق ، المستويات الطاقية لذرة الهيدروجين . كما

يتوجب ملاحظة أنه ـ وبشكل عام ـ كلما كانت القيمة l للمستوى الطاقي للهيليوم اعلى ، كان توافقها أوثق مع المستوى الطاقي لذرة الهيدروجين . والسبب في ذلك هو أن الالكترون الخارجي ، وفي حالة ℓ كبيرة ، لايتمكن ـ بشكل يذكر ـ من اختراق سحابة الشحنة الفراغية العائدة للالكترون الداخلي المحيط بالنواة . ويجدر التأكيد ، وبطريقة أخرى ، أن الحالات S تقع دون الحالات الهيدروجينية لأجل $Z = 1$، بشكل جوهري ، وذلك نظراً لأن المداريات S تخترق سحابة الشحنة الالكترونية و « تشهد » شحنة موجبة فعالة أكبر لدى النواة .

وضمن تقريب ثنائي الأقطاب الكهربائي لاتستطيع الانتقالات المرفقة بإشعاع أن تحدث بين مجموعة المستويات الثلاثية لذرة الهيليوم ومجموعة مستوياتها الأحادية . وبوسعنا رؤية ذلك من خلال دراسة مؤثر ثنائي الأقطاب ، والذي يحدد (وفي المرتبة الأولى) المفاعلة مع المجال الكهرمغنطيسي (انظر الفصل الخامس عشر). وهذا المؤثر ، والذي يتضمن فقط مواضع الجسيمات ، لايتوقف على البرم ، ولذا فإن عناصر المصفوفة الخاصة بالمؤثر المذكور سوف تساوي الصفر ، إلا إذا كانت تَجْمَع الحالات الأحادية مع حالات أحادية أخرى والحالات الثلاثية مع حالات ثلاثية . فلا توجد انتقالات تراكب تصالبي تقفز الذرة أثناءها من حالة ثلاثية صرف الى حالة أحادية صرف .

أما في حالة العناصر الثقيلة جداً ، والتي تملك الكترونين خارجيَّين ، وحيث حد المفاعلة البرمية ـ المدارية ضمن مؤثر هاملتون غير قابل للتجاهل ، لاتكون مجموعات المستويات الطاقوية أحاديةً صرفاً وثلاثيةً صرفاً ؛ وذلك لأن المفاعلة البرمية ـ المدارية قوية بما يكفي لجعل زخم البرم الزاوي الاجمالي عدداً كمياً غير جيد بالنسبة للنظام ، أي أن S لايبادل H. فبالنسبة لعناصر ثقيلة كهذه ، كالزئبق مثلاً ، توجد انتقالات تراكب تصالبي بين المجموعات « الثلاثية » و « الأحادية ». (وفي عنصر ثقيل من هذا النوع ، بوسعنا مرةً أخرى عدُّ الالكترونين الخارجيَّين يتحركان في مجال عادي ينجم هذه المرة عن الالكترونات الداخلية التي توفر مجال قوة فعالاً مركزياً ويتحرك ضمنه الالكترونان الخارجيان).

يمكن ، وفي حال الرغبة ، أخذ طاقات المفاعلة البرمية ـ المدارية و البرمية ـ البرمية (بين الكترونيَ ذرة الهيليوم) على شكل اضطرابات ضمن المعالجة السابقة . ونظراً لتفكك المستويات الطاقوية فانه من الضروري اختيار الحالات الطاقية غير

المضطربة ، بحيث يسفر ذلك عن مصفوفة قطرية لأجل تلك الحدود الاضطرابية . وليس العددان الكميان m_l و m_s ملائمين بعد الآن ، وذلك لأن المفاعلة البرمية ـ المدارية تدفع زخم البرم الى المبادرة المدارية . ولكن ، وانطلاقاً من أرضية التناظر الأساسي ، يجب أن يكون كلٌ من الزخم الزاوي الاجمالي J ومسقطه J_z ثابتين من ثوابت الحركة . وبالتالي ، فإن التمثيل المناسب لمناقشة هذه المفاعلات البرمية يتميز بالأعداد الكمية n_1 وn_2 وℓ وS وj وm_j . وفي الحالات الأحادية ، يتخذ j القيمة $j=\ell$ ، وفي الحالات الثلاثية يكون :

$$j = l + 1, l, l - 1 \geq 0$$

وفي الحالات الثلاثية التي تكون فيها $\ell>o$ يكون المستوى الطاقي متشعباً الى مجموعات من ثلاثة مستويات (« ثلاثيات ») توافقها قيم مختلفة من j . ويجب أن نلاحظ أن L و S ، وفي ظل المفاعلة البرمية ـ المدارية ، لايشكلان ، إذا تكلمنا بدقة ، ثابتَيْ حركة ، ولكن المفاعَلات البرمية ضعيفة ، أما بالنسبة للتقريب الجيد ، فإن كلاً من ℓ و s يمثلان عددين كميَّيْن مناسبين .

ولقد رأينا أن المفاعلة الكهرساكنة القوية بين الالكترونات ، والتي تكون مقرونةً مع مبدأ باولي ، تكافىء المفاعَلات البرمية ـ البرمية القوية التي تفصل الحالات الأحادية عن الحالات الثلاثية . وهكذا ، يربط مبدأ باولي ، وعلى نحو فعَّال ، زخمَيْ برم الالكترونَيْن أحدهما بالآخر ، وذلك مثلما يربط حركتيهما المداريتين معاً . ونظراً للمفاعلة البرمية ـ المدارية تتميز مختلف قيم j بطاقات طفيفة التباين . وإن هذا النمط من نظام الترابط بين الزخوم الزاويَّة ، والذي غالباً ماتكون الزخوم الفردية L فيه مترابطة ضمن Lإجمالي ، وتكون الزخوم S الفردية ضمن S إجمالي ، بينما يكون ترابط L و Sالاجماليَّيْن أضعف من أن يسفر عن J إجمالي ؛ هذا النمط من الترابط معروف باسم **ترابط رصِّل ـ ساوندرز أو الترابط L − S** . وهذا أمر يقبل التعميم الى حالة تحوي أكثر من الكترونين ، وترابط كهذا هو السائد عادةً بين العناصر الخفيفة .

عندما تكون الطاقات البرمية ـ المدارية كبيرة ، وكما هو الحال لدى العناصر الثقيلة ذات قيم Z العالية ، فانه قد يحدث أن تكون التشعبات البرمية ـ المدارية (أي التعددية) أكبر من التشعبات الناجمة عن الطاقة التبادلية . وأفضل تقريب في هذه الحالة ، يكمن في حساب المفاعلة البرمية ـ المدارية في المرحلة الأولى ، أي

المفاعلة التي تربط بين الزخوم الزاويّة ، البرمية منها والمدارية ، ولتسفر هذه المفاعلة عن الزخوم الاجمالية .... J_1 و J_2 لأجل كل واحد من الالكترونات . وعندئذٍ ، يجري ترابط الزخوم الفردية J عبر المفاعلة التبادلية التي تتم دراستها وكأنها اضطراب ضعيف . ويعرف هذا المخطط الترابطي باسم **الترابط j − j** .

17−5 ترابط التكافؤ في جزيء الهيدروجين .

سوف نقوم بدراسة ذرتي هيدروجين تتفاعل إحداهما مع الأخرى ، وذلك كمثال آخر يبيِّن تأثير الاحصائيات في سلوك النظام من الجسيمات ، حيث ، وعلى وجه التخصيص ، تميل قوى التكافؤ الى ابقاء هاتين الذرتين معاً ضمن جزيء . ويمكن النظر الى هذه المسألة وكأنها مسألة الكترونين ، وذلك من خلال افترضنا البروتونين ومجاليهما الكولوميَّيْن على أنهما مثبَّتين طالما أن المعني هو الحركات السريعة للالكترونَيْن . ونستطيع كتابة مؤثر هاملتون على الشكل التالي :

$$H = \frac{1}{2m}\left(P_1^2 + P_2^2\right) - \left(\frac{e^2}{r_{1A}} + \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{1B}} + \frac{e^2}{r_{2B}}\right) + \frac{e^2}{r_{AB}} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

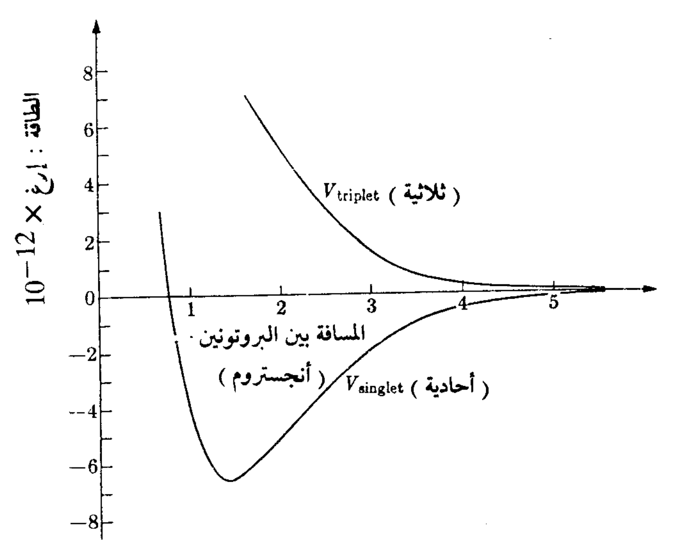
(17−31)

ويشير الدليلان a و b الى النواتين ، في حين يشير الدليلان 1 و 2 الى الالكترونين . واذا أخذنا بالحسبان فقط الجزء الفراغي من الدالة الموجية ، وافترضنا مجدداً أن القوى البرمية قابلة للتجاهل ، فإنه بوسعنا اختيار الدالات الموجية ، بحيث تكون إما متناظرة أو متعاكسة التناظر إزاء تبديل الموضع ، وترتبط الدالة المتناظرة بمجموعة البرم الأحادية لدى الالكترونين ، في حين ترتبط الحالة متعاكسة التناظر الفراغية بمجموعة البرم الثلاثية . وبالتالي ، وعندما تكون ذرَّتا الهيدروجين متباعدتين بما يكفي لكي تبدي الدالتان الموجيتان للالكترونين مجرد اضطراب طفيف المفاعلة بينهما ، فانه يمكننا كتابة الدالة الموجية الاجمالية كالآتي :

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_A(r_1)u_B(r_2) \pm u_A(r_2)u_B(r_1)\right] \qquad (17-32)$$

حيث تنطبق اشارة « زائد » على الحالة الأحادية (حالة التناظر المتعاكس في البرم)، بينما تنطبق اشارة « ناقص » على الحالة الثلاثية (حالة تناظر البرم).

وبمثابة تقريب أولي ، سنفترض أن مدارات الالكترونين ، وبالنسبة لهذا النمط من الدالة الموجية ، تتعرض لاضطراب طفيف فقط ناجم عن وجود ذرة الهيدروجين الأخرى ، مما يعني أن U_A (r1) و U_B (r2) هما دالتان موجيتان لذرَّتي الهيدروجين كلًّا على انفراد . أما لاحقاً ، فسنفترض أن هذا الشكل من الدالة الموجية سوف يبقى قائماً حتى عندما تصبح الذرتان على مقربة نسبية إحداهما من الأخرى . وبعد هذين الافتراضَين ، من الممكن حساب القيمة المتوقَّعة لمؤثر هاملتون في المعادلة (31−17) . فاذا قمنا بذلك ، سنحصل على المنحنين الطاقيَّين المبيَّنين في الشكل(17−3) ، وذلك



الشكل 17-3 كمونا المفاعلة الفعّالان لأجل ذرتي الهيدروجين في الحالتين الأحادية والثلاثية للالكترونين، وقد بيّناهما كدالتين تابعتين للمسافة بين النواتين. وواضح أن مجموعة البرم الأحادية فقط التي تسمح بظهور حالة ترابط (جزيء هيدروجيني).

بوصفهما دالتين تابعتين للمسافة بين البروتونين . وتُؤخذ في هذا الشكل طاقة ذرتي الهيدروجين المتباعدتين بمثابة طاقة الصفر ، وقد رُسم تغيُّر الطاقة الناجم عن المفاعلة بين الذرتين حين تتحركان معاً ، وذلك بالمقارنة مع المسافة بين البروتونين . ويجب أن نلاحظ أنه عندما تكون الذرتان في الحالة الأحادية ، فإن الطاقة تتناقص مع تقاربهما في

البداية ، ومن ثم تتزايد ، بينما تبقى هذه الطاقة على تزايد مستمر عندما تكون الذرتان في الحالة الثلاثية . وبالتالي ، فإن ذرتي الهيدروجين وفي حالة توازي برميهما ، تنفران دائماً من جزء التصادم فيما بينهما ، في حين اذا تصادمت إحداهما مع الأخرى ، وهما في الحالة الأحادية ، فانهما تتجاذبان .

يمكن رؤية الاعتبارات التي تقف خلف طبيعة منحني الطاقة في الشكل(17-3) على نحو نوعي ، وذلك من خلال دراسة الدالة الموجية في المعادلة (17-32) فكما رأينا سابقاً ، يميل الالكترونان الى التواجد في المكان نفسه عندما تنطبق اشارة « زائد »، بينما يميلان الى التباعد عندما تؤخذ اشارة « ناقص ». وإن المنطقة الوحيدة التي يتوجب علينا توقُّع أن يشغل الالكترونان فيها النقطة نفسها - باحتمالية ما ، أياً كانت قيمتها - هي منطقة ما بين البروتونين . لذلك نجد أنه ، وفي حالة « زائد » (الأحادية)، تكون الأفضلية لتواجد الالكترونين ما بين البروتونين ، وهما - وفي هذا الموضع - قادران على المفاعلة مع كل من البروتونين . صحيح أن هناك نوعاً من الطاقة التنافرية بين الالكترونين ، ولكن الانجذاب الى البروتونين المجاورين يقوم بأكثر من مجرد التغلب عليها . وعليه ، فان حالات كهذه هي حالات ذات طاقة كهرساكنة متدنية ، وذلك نظراً لدرجة انحناء المنحني الطاقي عندما تتحرك الذرتان معاً . وإن صعود هذا المنحني مع تقلص المسافة الفاصلة بين البروتونين بعد نقطة معينة ناجمٌ عن الاختراق المتبادل للسحابتين الالكترونيتين من قبل الالكترونين ، بحيث يتحاشى أحدهما الآخر ، ولذا فإن الصعود المذكور يجب أن يُعزى الى الطاقة التنافرية بين البروتونين .

ومن جهة أخرى ، ينزع الالكترونان في الحالة الثلاثية S =1 الى تجنب أحدهما للآخر ، ولذلك لايتواجدان في منطقة ما بين البروتونين ، وهي المنطقة التي يقومان فيها برصِّ البروتونين معاً رصاً قوياً . ولهذا تتزايد الطاقة بوتيرة واحدة مع تحرك الذرتين سويةً . وتتوافق حالة الترابط في جزيء الهيدروجين كون الذرتين مترابطتين ضمن البئر الكمونية الموافقة للمنحني السفلي في الشكل (17-3)، وذلك بما ينسجم مع زخم مساواة البرم الزاوي الاجمالي الصفر . ويُسمى هذا النوع من الترابط الجزيئي **الترابط التبادلي** .

يمكن أن ينتج فارق الطاقة بين الحالة المتناظرة فراغياً والحالة متعاكسة التناظر ، ولدى زوج من ذرات الهيدروجين ، عن التبادل الدوري للالكترونين بين النواتين .

وهذا ما يمكن رؤيته اذا لاحظنا أن الحالة التي يكون زخم البرم فيها لدى الكترون احدى الذرتين موجباً في البداية ، بينما يكون الآخر سالباً ، هي (أي الحالة) تراكب بين حالات مختلفة الطاقة $S = 0, S = 1$. وهي بالتالي ، حالة غير مستقرة ، يتم فيها تبادل الزخم بين الالكترونين بتردد يحدده فارق الطاقة بين الحالتين الأحادية والثلاثية .
واذا كانت الذرتان على تباعد كبير فلايوجد ثمة فارق في الطاقة ، ويمكن عدُّ كل الكترون ملحقاً بنواته الخاصة .

17-6 الهيدروجين المساير والهيدروجين الصحيح .

سوف نقوم بدراسة جزيء الهيدروجين مرةً أخرى ، وذلك كمثالٍ أخير على تأثير الاحصائيات في حركة الجسيمات ، وسوف نقوم الآن بمعالجة الجزيء بوصفه نظاماً من جسيمين مع ملاحظة أن الالكترونين يتحركان بسرعة كبيرة ، وذلك مقارنة مع سرعة النواتين ، مما يسفر عن مجال قوة فعّال تتحرك فيه النواتان . (وتلك هي القوة التي ينشأ عنها الكمون المبينّ في الشكل(17-3) . فاذاً سوف ندرس جزيء الهيدروجين الآن كنظام يتألف من جسيمين هما النواتان . ولأجل نظام كهذا ، بوسعنا كتابة مؤثر هاملتون كالآتي :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathrm{P}_A^2 + \mathrm{P}_B^2\right) + V(r_{AB}) \qquad (17-33)$$

لايشتمل الحد الخاص بالطاقة الكامنة على التنافر الكهرساكن بين البروتونين فحسب ، وإنما يشتمل أيضاً على الكمون الفعال الناشىء عن مجال الالكترونين في حركتهما حول البروتونين . وبعد إدخال كل من نظام مركز الكتلة للاحداثيات ومفهوم الموضع النسبي لبروتون إزاء الآخر ، يمكننا أن نكتب مؤثر هاملتون على الشكل التالي :

$$\mathrm{H} = \frac{1}{2M}\mathrm{P}^2 + \frac{1}{2\mu}\mathrm{p}^2 + V(r) \qquad (17-34)$$

حيث : M − الكتلة الاجمالية للنظام و μ − الكتلة المختزلة لأجل حركة البروتونين النسبية و P − زخم مركز الكتلة و p − الزخم المرفق بالحركة النسبية و V − الكمون الفعال للحركة النسبية .

ويمكن أن تكتب الدالات المميزة الطاقوية ، ولأجل مؤثر هاملتون على الشكل التالي :

$$\psi_{lm_l s m_s} = \exp(ik \cdot R) g(r) Y_{lm}(\theta, \phi) v_{sm_s} \qquad (17-35)$$

إن كلاً من الزخم الزاوي المداري الاجمالي للنواتين والمركَّبة Z من زخمهما الزاوي المداري وزخم البرم الزاوي الاجمالي لهما والمركبة Z من زخم البرم الزاوي هذا ، جميعها تبادل مؤثر هاملتون ، وقد استفدنا من علاقات المبادلة بغية التوصل للمعادلة (17−35) . (ولقد رأينا آنفاً أن البرم الالكتروني الاجمالي يساوي الصفرفي الجزيء المترابط) . ويمثل الحدُّ الأخير في المعادلة الدالة البرمية التي تصف اتجاه البرم لدى البروتونين .

ويمكن أن تكتب القيمة المميزة للطاقة الموافقة للطاقة الداخلية لدى الجزيء على الشكل التالي :

$$E_{lm_l} = \frac{1}{2I} l(l+1)\hbar^2 \qquad (17-36)$$

حيث أن الثابت I، والذي يمكن تفسيره بمثابة عزم القصور الذاتي لدى الجزيء ، يتوقف على المسافة الفاصلة بين البروتونين المميزة للنهاية الأصغرية لدالة الطاقة الكامنة ، ويُفترض أن ما يسمى « تأثير الكمون النابذ مركزياً » قابل للتجاهل ، بحيث يمكن النظر الى I على أنه ثابت في مخرج المعادلة (17−36) .

لم نقل حتى الآن شيئاً حول طريقة ضمان التناظر لدى الدالة الموجية . يخضع البروتونان لاحصائيات فيرمي ، وبالتالي يتوجب اختيار الدالة الموجية بحيث تكون متعاكسة التناظر ازاء تبديل البروتونين . وبما أن الاحداثي r يمثل موضع أحد البروتونين بالنسبة للبروتون الآخر ، فان تبديل الجسيمين لايغير سوى اتجاه هذا المتجه ، مما يسفر عن تحويل التوافقية الكروية الداخلة في المعادلة (17−35) وهذا التحويل هو :

$$P_{AB} Y_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) \qquad (17-37)$$

اذا كان الجزء الموضعي شفعياً ، والعكس بالعكس . لذا ، يتوجب أن يقترن ℓ الشفعي بالحالات الأحادية للبرم النووي ، في حين يجب أن يقترن ℓ الوتري بالحالات الثلاثية . فمثلاً ، اذا كان الجزيء في حالته الاهتزازية الدنيا ، حيث ℓ يساوي الصفر ، فإنه يجب أن يكون $s = 0$ لأجل هذه الحالة ، أو ، وبكلماتٍ أخرى ، يجب أن يكون برما البروتونين متعاكسين .

تتمتع العلاقة بين شفعية العدد الكمي ℓ أو وتريته وزخوم البرم النووية بنتيجة هامة . فبالنسبة للبروتونين ، اللذين يكون برماهما متعاكسين ، توجد ثلاثة اتجاهات ممكنة لزخم البرم الزاوي الاجمالي ، وبالتالي فان الحالات ℓ الوترية تملك وزناً احصائياً يساوي ثلاثة أضعاف ما هو عليه لو كان البروتونان بلا برم . ومن جهة أخرى ، يتخذ الوزن الاحصائي لكل حالة من الحالات ℓ الشفعية قيمته الطبيعية بالنسبة للجسيمات عديمة البرم . وكنتيجةٍ ، تحصى الحالات ℓ الوترية ، وفي ظل التوازن الحراري تحت درجات الحرارة المعتدلة والعالية ، بثلاثة أضعاف عدد الجزيئات ذات ℓ الشفعية .

هناك تأثير هام آخر يظهر في ظل درجات الحرارة المتدنية بفعل تحفيز ملائم . ففي ظل درجات الحرارة المتدنية جداً ، تستقر جميع الذرات في حالة الطاقة الاهتزازية الأدنى ، وبالذات في حالة $\ell=o$ ، أي الحالة التي تكون جميع زخوم البرم فيها متعاكسة . وتُسمى الحالات ، التي تكون زخوم البرم فيها متعاكسة حالات **الهيدروجين المساير** . ومن الناحية الأخرى ، يتألف **الهيدرزجين الصحيح** من جزيئات تقع في الحالات الثلاثية لبرم النوى الذرية $s = 1$. والآن ، يمكن في ظل درجات حرارة متدنية جداً (دون $20°K$ مثلاً) ، وبعد أن تستقر جميع الجزيئات في الحالة المسايرة ، إبعاد المحفِّز وتسخين الهيدروجين . وتكون المفاعَلات بين عزوم ثنائيات الأقطاب المغنطيسية المرافقة لمختلف نوى الهيدروجين ضعيفة لدرجة أن الهيدروجين المساير يستطيع البقاء لفترة طويلة جداً في ظل درجات الحرارة العالية دون اعادة تحوّله إلى التوازن عالي الحرارة ، حيث تناسب المركّبة الصحيحة والمركبة المسايرة هو $3:1$. ويمكن تمييز هذا الشكل غير المتوازن من الهيدروجين عن الشكل المتوازن العادي ، وذلك لأن هناك فوارق طفيفة في الخواص بين الهيدروجين المساير والهيدروجين الصحيح . فمثلاً ، تختلف السعات الحرارية بين نوعي الهيدروجين الغازيِّ ، وذلك نظراً لأن المسافات الفاصلة بين مستويات الطاقة الاهتزازية تختلف من الحالات ℓ الشفعية الى الحالات ℓ الوترية .

17 − 7 النُظم المتضِّمنة لأكثر من جُسيمين .

إن مناقشتنا لتأثير تطابق الجسيمات في ميكانيك الكم كانت مقتصرة في هذا الفصل على النظم التي تتكون من جسيمين . ولقد مارسنا ذلك بقصد التبسيط ، وذلك لأنه يمكن تقديم الأفكار الفيزيائية الرئيسة دون اللجوء الى تناول النظم الأكثر تعقيداً ، حيث تميل الفيزياء الى الاندغام في الصياغة الرياضية . وعلى الرغم من ذلك ، يمكننا تعميم الشكلانية . فبالنسبة لنظام من n جزيئاً ، يوجد $\frac{1}{2} n(n-1)$ مؤثراً لتبديل الجسيمات ، ويتوجب أخذ هذه المؤثرات ضمن تراكب يتضمن متتاليات مختلفة لتشكل $n!$ من مؤثرات التبديل ، والتي تشكل ـ مجتمعةً ـ زمرةً جبرية . وحين لايكون مؤثر هاملتون تابعاً لمؤثرات البرم الخاصة بالجسيمات المنعزلة ، فإن زخم البرم الزاوي الاجمالي يتبادل مع كل عناصر الزمرة التبديلية ومع مؤثر هاملتون . عندئذٍ ، تقود تأثيرات المفاعلة الكهرساكنة بين الجسيمات وتأثيرات إحصائيات الجسيمات الى ازالة التفكك عن الحالات ذات القيم المختلفة من sالاجمالي ، تماماً كما في حالة ذرة الهيليوم . وهكذا ، يبقى مخطط الترابط $L-S$ صالحاً بشكل عام لأجل جميع الذرات التي تكون المفاعلة البرمية ـ المدارية فيها صغيرة .

17−8 خلاصة

درسنا في هذا الفصل تأثير عدم قابلية التمايز بين الجسيمات الذرية في شكلانية ميكانيك الكم . وقادنا عدم القابلية للتمايز الى كلٍ من مفهوم جسيمات فيرمي التي تملك دالة موجية متعاكسة التناظر ازاء تبديل الجسيم ومفهوم جسيمات بوزيه التي تملك دالة موجية متناظرة ازاء تبديل الجسيم . ومن ثم تناولنا جسيمات فيرمي بدراسة أكثر تفصيلاً ، وذلك نظراً لأن الجسيمات الأولية الشائعة (الالكترونات والبروتونات والنيترونات) تخضع لاحصائيات فيرمي . كما جرى إدخال تسمية الحالات الأحادية والثلاثية . وقد ناقشنا تأثيرات التناظر البرمي في طاقات المفاعلة الكهرساكنة بين اثنين من جسيمات فيرمي ، ثم بيَّنا تلك التأثيرات من خلال المثال الخاص بذرة الهيليوم . ثم استخدمنا تلك التأثيرات لشرح الترابط في جزيء الهيدروجين . ولقد درسنا دور الاحصائيات ، التي يخضع لها البرم النووي ، في خلق شكلين مختلفين من الهيدروجين ، هما الهيدروجين الصحيح والهيدروجين المساير ، ثم ذكرنا بايجاز طريقة تطوير الشكلانية لتشمل النظم المتضمنة لأكثر من جسيمين .

مسائل

17–1 يوضع جسيمان ، كتلة كلٍ منهما m ، في صندوق مستطيل أضلاعه $a \neq b \neq c$ ، بحيث يشغل النظام حالته الطاقية الأدنى ضمن الشروط المصاغة أدناه . وبفرض أن الجسيمين يتفاعلان فيما بينهما وفقاً للكمون $V = V_0\,\delta(r_1 - r_2)$ ، استخدم المرتبة الأولى من نظرية الاضطراب لحساب طاقة النظام ضمن الشروط التالية : أ) الجسيمان غير متطابقين . ب) الجسيمان متطابقان وبرم كل منهما يساوي الصفر . ج) الجسيمان متطابقان وبرماهما ، المساويان ½ ، متوازيان .

17–2 احسب المقطع العرضي (بما في ذلك تبعيته البرمية) لتبعثر النيترونات الحرارية من قبل نيترونات . افترض أن المفاعلة بين النيترونات تابعة للبرم ولها شكل بئر كمونية نصف قطرها r_0 وعمقه V_0 .

17–3 أ) صُغ مبدأ استثناء باولي وناقش تطبيقه . ب) بيِّن ، وبشكل مفصل ، كيف يمكن بمساعدة هذا المبدأ ترتيب العناصر في الجدول الدوري وفقاً لخواصها الكيميائية ؟ ج) لماذا تتميز العناصر نادرة الوجود في الطبيعة بخواص كيميائية متشابهة ؟ د) لماذا المعادن القلوية متشابهة ؟

17–4 ناقش بنية المستويات الطاقوية لذرة الهيليوم .

17–5 احسب المقطع العرضي التفاضلي للتبعثر في حالة التبعثر المتبادل لكرتين صلبتين متطابقتين ، برم كل منهما ½ ، ونصف قطرها $a \ll \lambda$. احسب التأثيرات الخاصة بالأمواج S, P, D ، ولكن تجاهل الأمواج الجزئية ذات المراتب العليا .

17–6 أ) بيِّن أن مؤثر تبديل البرم يمكن أن يكتب على النحو التالي :

$$S_{12} = \frac{1}{\hbar^2}\left[S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} + (2S_{1z}S_{2z} + \tfrac{1}{2}\hbar^2)\right]$$

(**توجيه** : بين أن الحد الأول ما بين القوسين يغير الحالة البرمية +− الى − + ويسفر عن صفر لأجل الحالات البرمية الثلاث المتبقية ذات المعادلة (17–12) . ما هي العمليات التي تنجم عن الحدَّين المتبقيين ما بين القوسين ؟) ب) بيِّن أن

مؤثر تبديل البرم الوارد أعلاه يمكن تسجيله كالآتي :

$$\mathbf{S}_{12} = \frac{1}{\hbar^2}\left(?\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \tfrac{1}{2}\hbar^2\right)$$

ج)بيِّن أنه يمكن كتابته كذلك بالصيغة التالية :

$$\mathbf{S}_{12} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\mathrm{S}^2 - \hbar^2\right)$$

الفصل الثامن عشر

ميكانيك الكم الاحصائي

18-1مدخل .

كان عرضنا حتى الآن لميكانيك الكم يعنى بتوصيف النظم التي تشغل حالات **صافية** ، أي حالات ذات دالة موجية معروفة . أما هذا الفصل فسيتناول دراسة النظم التي يتاح لنا فقط المعرفة غير الكاملة لحالتها . وسوف نقول عن نظم كهذه إنها في حالات **خليطة** . ويتوجب معالجة هذه النظم بوساطة تقنيات احصائية مناسبة . إن القرين الكلاسيكي للاحصائيات الكماتية هو الميكانيك الاحصائي الكلاسيكي ، والذي طوَّره بولتزمان وجيبس وآخرون . ونظراً لأن طابع ميكانيك الكم احصائي بحد ذاته ، فان الاحصائيات الكماتية تشتمل على مستويين منفصلين من الدراسة الاحصائية ، فالمستوى ، الذي يتعلق بالتوزيع الاحصائي للقياسات الجارية على النظم ذات الدالة الموجية المتطابقة قد سبق لنا معالجته ، أما المستوى الثاني فيتعامل مع التوزيع الاحصائي للنظم بين مختلف الدالات الموجية ، والتي تقترن بمعرفة غير كاملة عن حالة النظام قيد البحث .

من المفيد كما في الكثير من المسائل الاحصائية ادخال فكرة مجمَّع النظم المتشابهة . ولنأخذ مجمَّعاً ذا دالات موجية ممكنة ... $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots$ ، عندئذٍ ، يتم التوصيف الكامل للتجمُّع بوساطة تعريف الأعداد ... $n_1, n_2, n_3, \ldots$ ، والتي يمثل كل منها عدد النظم n_j التي تصفها الدالة الموجية ψ_j . ولكن جملة الأعداد n_j قد تتضمن معلومات ليست ذات مدلول فيزيائي . فمثلاً ، وكما أكدنا سابقاً ، لايمكن التمييز بين نظامين تختلف دالتاهما الموجيتان من حيث الطور فقط . ومن الواضح أن ادخال الدالات ، والتي تختلف فقط من حيث الطور ، ضمن جملة ψ_j ليس ضرورياً ولا مرغوباً فيه . وقد تكون هناك أيضاً زيادات أخرى يتوجب إبعادها .

إن خواص التجمع ذات المدلول الفيزيائي هي فقط دالات توزيع كلٍّ من القياسات الممكنة ، والتي نستطيع إجراءها على نظم التجمع . وعليه ، اذا كانت

P(q) تمثل احتمالية أن يُسفر قياس الملحوظ Q في أحد أعضاء التجمع عن النتيجة q منسوبة (أي الاحتمالية) الى واحدة q ، فان دالة التوزيع P(q)تُقدم كل المعلومات ذات المدلول الفيزيائي ، والتي يمكن الحصول عليها من قياسات Q حول التجمع .

تحدِّد دالة التوزيع $P(q)$ القيم المتوسطة لكل قوى Q وذلك من خلال المعادلة التالية :

$$[Q^n] = \int P(q) q^n \, dq \qquad (18-1)$$

هنا ، وفيما تبقّى من هذا الفصل ، سوف يُستخدَم القوسان المربعان [] للدلالة على المتوسط التجمُّعي (نسبةً الى التجمع) . وبالعكس ، فان هذه القيم المتوسطة ، أو الزخوم ، تحدد دالة التوزيع ، وهذا ما يمكن تبيانه بسهولة لأجل دالات التوزيع ذات السلوك الجيد ، أي التي يكون مربعها قابلاً للمكاملة ، وذلك بوساطة ادخال المتغيرات k وضرب المعادلة (18-1) بالمقدار $i^n k^n / n!$ ، ثم اجراء الجمع بموجب n :

$$\begin{aligned} W(k) &\equiv \sum_n \frac{1}{n!} i^n k^n [Q^n] \\ &= \int P(q) \exp(ikq) \, dq \end{aligned} \qquad (18-2)$$

إن الدالة $W(k)$ ، والمعرَّفة أعلاه كمجموع ، هي تحويل فورييه للدالة P(q)، ولذلك يمكن تعريف P(q) من العلاقة :

$$\begin{aligned} P(q) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W(k) \exp(-ikq) \, dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_n \frac{1}{n!} i^n k^n [Q^n] \exp(-ikq) \, dk \end{aligned} \qquad (18-3)$$

والتي تبينّ لنا أن التوصيف الفيزيائي الكامل لتجمُّعٍ من نظم متشابهة يتم ، وضمن شروط كهذه ، عبر القيم المتوسطة لجميع الكميات الملحوظة الخاصة بالنظام (حيث يجري النظر هنا الى مختلف قوى الكمية الملحوظة على أنها كميات مختلفة) .

وتعطي القيمة المتوقعة <Q> للملحوظ Q متوسط الكمية الملحوظة ، وذلك

عندما يكون للنظام دالة موجية محددة . وبهدف الحصول على المتوسط التجمعي ، لابد من حساب القيمة المتوسطة لـ <Q> عبر التجمع كله :

$$[Q] = [\langle Q\rangle] = [(\psi, Q\psi)] \qquad (18-4)$$

18-2 مصفوفة الكثافة .

من الملائم ، وخلال معالجتنا لسلوك التجمعات الاحصائية ، ادخال مفهوم **دالة الكثافة** ρ ، والتي تعرَّف على النحو التالي :

$$\rho(x, x') \equiv [\psi(x)\bar{\psi}(x')] \qquad (18-5)$$

فبلغة دالة الكثافة ، يمكن كتابة المعادلة (18-4) كالآتي :

$$[Q] = \int \delta(x - x')Q\rho(x, x')\, dx\, dx' \qquad (18-6)$$

ويؤثر المؤثر Q فقط في المتغير ρ في x . وبما أن Q مؤثر هرميتي ، فان :

$$\begin{aligned}[Q] &= \int \overline{Q\, \delta(x - x')}\rho(x, x')\, dx\, dx' \\ &= \int Q'\, \delta(x' - x)\rho(x, x')\, dx\, dx'\end{aligned} \qquad (18-7)$$

أما الآن ، فإن Q يؤثر فقط في المتغير الموسوم في الحد $\delta(x' - x)$ ويجدر تمييز الدالة :

$$Q(x', x) \equiv Q'\, \delta(x' - x) \qquad (18-8)$$

على أنها عنصر مصفوفي للمؤثر Q اذا أُخِذ هذا التمثيل ضمن التمثيل الموضعي القطري (راجع الفصل الحادي عشر). ويطرح هذا الأمر تفسير دالة الكثافة بمثابة **مصفوفة الكثافة** المعرَّفة بالعلاقة التالية :

$$\rho \equiv [\psi\psi^*] \qquad (18-9)$$

حيث : ψ متّجه ـ عمود ، و ψ^* قرينها الهرميتي . وبذلك تكون هذه المعادلة تعريفاً لمصفوفة مربعة تعطى عناصرها بالمعادلة (18-5) . ويمكن بالترميز المصفوفي كتابة المعادلة (18-7) كالآتي :

$$\begin{aligned}[Q] &= \operatorname{tr} Q\rho = \int Q(x', x)\rho(x, x')\, dx\, dx' \\ &= \operatorname{tr} \rho Q\end{aligned} \qquad (18-10)$$

فالمتوسط التجمعي لـ Q يُستخلَص بحساب أثر المصفوفة الناتجة عن جداء كلٍ من Q و ρ ، حيث يمكن أن يؤخذ الجداء بترتيب آخر ، وتلك خاصة شاملة من خواص أثر الجداء المصفوفي .

لاتتغير المعادلة (18–10) أثناء التحويل التماثلي كما ذكرنا خلال مناقشتنا للمعادلة (13–34) . ولكي نرى ذلك ، وبطريقة أخرى ، سنصوغ العلاقة التالية :

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} Q\rho &= \operatorname{tr} T^{-1}TQT^{-1}T\rho \\ &= \operatorname{tr} TQT^{-1}T\rho T^{-1} \\ &= \operatorname{tr} Q^{\dagger}\rho^{\dagger} \end{aligned} \qquad (18-11)$$

حيث استفدنا من حقيقة أن أثر المصفوفة كمية لاتغيُّرية إزاء تغيُّر ترتيب العامل T^{-1} . وبهذا ، تكون المعادلة (18–10) صالحة لأجل أي شكل من أشكال التمثيل المصفوفي (راجع أيضاً الفصل الثالث عشر) .

وبما أنه يمكن استخدام المعادلة (18–10) للحصول على القيم المتوسطة لكل الملحوظات ، **فإنه يجب على مصفوفة الكثافة أن تتضمن كل المعلومات الهامة فيزيائياً المعروفة عن التجمع** . وهذه المعلومات ، تكون عادةً ، أقل من تلك المتضمَّنة في تعداد الترددات النسبية لكل الدالات الموجية الممكنة . إن هذا الموقف لامثيل كلاسيكياً له ، وهو يقود الى تناقضات مثيرة ، سوف نناقش بعضاً منها فيما بعد . والآن ، سندرس بايجاز عدداً من خواص مصفوفة الكثافة .

إنها ، أولاً ، مصفوفة هرميتية . ويتضح ذلك عند تشكيل القرين الهرميتي للمعادلة (18–9) ، أو ـ على نحو مكافىء ـ بتبديل x' و x وأخذ المترافق العقدي للمعادلة (18–5) . أما ثانياً ، فان أثر المصفوفة ρ يساوي الواحد . وهذا ينتج عن عملية استنظام الدالات الموجية :

$$\int \rho(x, x)\, dx = 1 \qquad (18-12)$$

وبما ان شكلانية مصفوفة الكثافة مفيدة ، وعلى نحو تخصيصي ، لتوصيف الحالات الخليطة ، فانها تنطبق أيضاً على الحالات الصافية ، وعندئذٍ ، تكون القيم المميزة لـ ρ هي 0 و 1 ، إذ إن القيمة1 غير مفككة . ولكي نرى ذلك ، سنربِّع المعادلة (18–9) ، مهملين الأقواس :

$$\rho^2 = \psi\psi^*\psi\psi^* = \psi\psi^* = \rho,$$
$$\rho(\rho - 1) = 0 \qquad (18-13)$$

يجب أن تكون القيمة المميزة1 غير مفككة ، وذلك لأن أثر ρ ـ وهو مجموع القيم المميزة ـ يساوي الواحد .

ويجب أن نلاحظ أن العناصر القطرية في ρ تمثل احتمالية العثور على النظام ضمن التجمع باحداثيات x منسوبة الى واحدة x . وبشكل مماثل ، إذا جرى ترقيم الحالات المستقرة بوساطة الدليل n ، والذي يمثل الحالات الذاتية للطاقة ، فان مصفوفة الكثافة في التمثيل الطاقوي القطري ستكون لها عناصر متقطعة P_{nn} ، وتمثل هذه العناصر احتمالية العثور على النظام ضمن التجمع في الحالة الطاقية n . واذا وسمنا الدالة الموجية الموافقة بـ $u_n(x)$ فإن $u_n(x)$ ، عندئذٍ ، يجب تفسيرها ـ كما بيّنا في الفصل الثالث عشر ـ بمثابة عناصر مصفوفة واحدية يمكن استخدامها لتحويل ρ الى التمثيل الطاقوي القطري :

$$\rho_{nn'} = \int \overline{u_n}(x)\rho(x, x')u_{n'}(x')\, dx\, dx' \qquad (18-14)$$

ويجب أن نلاحظ أنه اذا كان النظام ، وعلى نحو محدد ، في الحالة الطاقوية n ، فان :

$$\rho(x, x') = u_n(x)\overline{u_n}(x'), \qquad (18-15)$$
$$\rho_{nn'} = \delta_{nn'}$$

نستطيع ، وبطريقة مماثلة ، استخدام تمثيل آخر لجعل دالات توزيع الاحتمالية الخاصة بالملحوظات الأخرى تظْهر على قطر مصفوفة الكثافة .

وكتطبيق أولي على شكلانية مصفوفة الكثافة ، سندرس مصفوفة الكثافة في حالة تجمُّع من الالكترونات غير المستقطَبة ، أي الالكترونات ذات الحالات البرمية العشوائية تماماً . وسوف نستخدم تمثيلاً قطرياً يعتمد على المركبة z من برم الالكترون . ففي هذه الحالة ، تكون مصفوفة الكثافة مساوية نصف مصفوفة التطابق :

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad (18-16)$$

ويمكن أن نرى ذلك على النحو التالي : لنلاحظ أولاً أن اتجاهي البرم (قياساً لاتجاه المحور z) يتمتعان باحتمالية متساوية . وكذلك ، فإن القيمة المتوسطة لأية مركبة من مركبات البرم يمكن الحصول عليها من العلاقة :

$$[\sigma] = \text{tr}\, \sigma\rho = \tfrac{1}{2}\, \text{tr}\, \sigma = 0 \qquad (18-17)$$

وذلك لأن أثر أية مصفوفة σ ، خاصةً بمركبة من مركبات البرم ، يساوي مجموع القيمتين المميزتين للبرم . وهكذا ، فإن مصفوفة الكثافة في المعادلة (16-18) تصف ما يقصد عادةً بتجمُّع الالكترونات غير المستقطبة وبالذات الالكترونات التي لا تتميز باتجاه برم معين . وبوسعنا رؤية أن هذا التوصيف لتجمّع الالكترونات غير المستقطبة فريد من نوعه (ضمن هذا التمثيل)، وذلك نظراً لأن أية مصفوفة أخرى سيكون لها عناصر قطرية غير متساوية بعد تحويلها الى الشكل القطري . وتوافق مصفوفة كثافة قطرية كهذه ، وذات عناصر قطرية غير متساوية ، حالة امتداد البرم الصافي على طول المحور z في نظام الاحداثيات بعد التحويل .

من الملائم توسيع فكرة **الحالة العشوائية تماماً** لتشمل كل النظم ذات العدد النهائي N من الحالات . وتساوي مصفوفة الكثافة في هذه الحالة العشوائية تماماً ما يلي :

$$\rho = \frac{1}{N}\mathbf{I} \qquad (18-18)$$

إنه لأمر هام وذو دلالة أننا نستطيع أن نعد تجمع الالكترونات غير المستقطَبة تماماً مكوناً من الكترونات ، حيث يكون كل واحد منها موجَّهاً إما في الاتجاه الموجب أو السالب للمحور z ، وذلك **لأجل أي اتجاه للمحور z . وهكذا ، يمكن تمرير حزمة من الالكترونات غير المستقطَبة عبرجهاز يقيس مثلاً المركبة z من برم كل الكترون في التجمع . واذا كان الجهاز لا يفصل بين الالكترونات أو « يَسِمها » بأية طريقة كانت ، فان التجمع لايتأثر بالقياس ، ويبقى عشوائياً تماماً .**

إن هذا التفسير للتجمع العشوائي ، على أنه خليط من النظم التي تشغل الحالات الصافية المعنية ،هو تفسير مكافىء لتجزئة مصفوفة الكثافة الى جزءين أو أكثر ، حيث يصف كل منها حالة صافية . فمثلاً ، إذا عُدنا ثانيةً الى نظام من زخوم البرم الالكترونية ، فإنه يمكننا تجزئة مصفوفة الكثافة :

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \qquad (18-19)$$

على النحو التالي :

$$\rho = \tfrac{1}{2}\rho_1 + \tfrac{1}{2}\rho_2 \qquad (18-20)$$

حيث :

$$\rho_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{و} \quad \rho_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad (18-21)$$

هما مصفوفتا الكثافة اللتان تمثلان الالكترونات الموجَّهة في الاتجاه (x +) والاتجاه (z +) على التوافق . وتشير هذه التجزئة إلى أن التجمع مكافىء لخليط عددين متساويين من الالكترونات الموجهة ضمن هذين الاتجاهين ، ولكنها ليست التجزئة الوحيدة الممكنة . فعلى سبيل المثال ، هناك تجزئة أخرى ممكنة ، هي :

$$\rho = \frac{\sqrt{2}+1}{2\sqrt{2}}\rho_3 + \frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{2}}\rho_4 \qquad (18-22)$$

حيث :

$$\rho_4 = \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \sqrt{2}-1 & -1 \\ -1 & \sqrt{2}+1 \end{bmatrix} \quad \text{و} \quad \rho_3 = \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \sqrt{2}+1 & 1 \\ 1 & \sqrt{2}-1 \end{bmatrix}$$

$$(18-23)$$

تمثلان ، وبالترتيب ، تجمُّع زخوم البرم الموجَّهة في المستوي(x z) ضمن زاوية $45°$ بالنسبة لكل من المحورين x و z ، وتجمُّع زخوم البرم الموجَّهة في الاتجاه المعاكس . وبهذا ، فان التجزئة في المعادلة (22 − 18) تمثل خليط الكترونات مجزأ الى قسمين $(\sqrt{2}+1)/2\sqrt{2}$ و $(\sqrt{2}-1)/2\sqrt{2}$ من الالكترونات الموجهة ضمن الاتجاهين المذكورين .

يظهر أحياناً تشويش بسبب كون مصفوفة الكثافة الخاصة بحالة خليطة معينة تقبل التجزئة بأكثر من طريقة ، ولذا يوجد التباس في التمثيل التجمعي للحالة الخليطة . وتقدم لنا بعض المقالات المتعلقة بالفيزياء الالكترونية مثالاً مثيراً على

ذلك ، وبخاصةٍ في حالة تداخل الالكترونات . ففي تجارب التداخل الالكتروني هذه ، يتم انبعاث الالكترونات من مهبط ساخن ، ثم يجري تسريعها وتشكيل حزمة الكترونية تستخدم بعدئذٍ لقذف رقائق التبعثر . ولقد كان شعور بعض الباحثين في هذا الميدان يكمن في أن انبعاث الالكترونات عن المهبط يجري على شكل رُزَيمات موجية ذات انتشار طاقوي يساوي الانتشار الطاقوي الذي يلاحظ لدى حزمة الالكترونات . وهكذا ، أُجري حساب تأثيرات التداخل الالكتروني من خلال استخدام تلك الرزيمات الموجية بمثابة دالات موجية للالكترونات .

ولكن مصفوفة الكثافة ، التي تصف حالة الالكترون المنبعِث من المهبَط ، تتمتع بشكل يسمح بتجزئتها الى حالات صافية متساوية الطاقة أو الى حالات صافية للرزيمات الموجية . لهذا فإن التمثيل التجمُّعي للحالة الخليطة مشوَّش ، ورغم أنه يمكن عدُّ الالكترونات منبعثةً على شكل رزيمات موجية ، فإنه لايتوجب القيام بذلك . فبما أن حسابات التداخل قابلة للانجاز على نحو أسهل ، وذلك بوساطة الدالات الموجية متساوية الطاقة ، فمن الملائم أكثر دراسة كل الكترون وكأنه يمتلك طاقة محددة . وهذان التوصيفان متكافئان فيزيائياً .

لكي نبينّ تكافؤ التمثيلين ، سوف نتجاهل ـ ولأجل السهولة ـ حركة الالكترون العرضية بالنسبة لسطح المهبط (والذي نعدُّه مستوياً) وسوف نستخدم التمثيل الموضعي القطري لأجل الدالات الموجية ومصفوفة الكثافة . فبفرض أن الالكترون ينبعث على شكل رزيمة موجية ، نستطيع كتابة دالته الموجية بعد الانبعاث كالآتي :

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp \{i[kx - \omega(t - t_0)]\} \, dk \qquad (18-24)$$

علماً أن :

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \qquad (18-25)$$

حيث : t_0 — زمن الانبعاث ، و $A(k)$ تعطي شكل الرزيمة الموجية . وتنبعث مختلف الالكترونات خلال أزمنة t_0 مختلفة ، ويمكن عدُّها عشوائية . ويمكن الحصول على دالة الكثافة من خلال حساب المتوسط ضمن فترة t_0 :

$$\rho(x, x', t) = [\psi(x, t)\overline{\psi(x', t)}]_{t_0} \qquad (18-26)$$

هناك ، وضمن المتوسط الزمني خلال to ، حدود تصالبية من المعادلة (18−34) لاتساوي الصفر ، ويمكن الحصول عليها فقط حين يكون الترددان متساويين ، مما يعني تساوي k . ولذلك :

$$\rho(x, x', t) = \int |A|^2 \exp[ik(x - x')]\, dk \qquad (18-27)$$

حيث نجد أن التبعية الزمنية قد اختفت .

يقبل هذا التجمُّع الدراسة ، بالقدر نفسه من النجاح ، وكأنه تجمُّع لحالات متساوية الطاقة (أو حالات أمواج مستوية) لها دالات موجية على الشكل التالي :

$$\psi_k = \exp[i(kx - \omega t + \delta_k)] \qquad (18-28)$$

ويمكن كتابة مصفوفة الكثافة على شكلٍ مجزأً الى مصفوفات كثافة ، حيث يمثل كل منها إحدى حالات الأمواج المستوية المذكورة :

$$\rho(x, x') = \int |A(k)|^2 \psi_k \overline{\psi_k}\, dk \qquad (18-29)$$

ويجب أن نلاحظ أن احتمالية أن يكون زخم الالكترون مساوياً k (وبالنسبة لواحدة k)، تساوي (أي احتمالية) $|A(k)|^2$ لأجل التجمُّعين كليهما .

18−3معادلة الحركة لأجل مصفوفة الكثافة .

يمكن الحصول على معادلة الحركة لأجل مصفوفة الكثافة بسهولة من معادلة شرودينغر ، والتي نستطيع كتابتها بلغة المصفوفات كالآتي :

$$\mathsf{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (18-30)$$

واذا ضربنا هذه المعادلة بالقرين الهرميتي ψ^* من اليمين ، سنجد أن :

$$\mathsf{H}\psi\psi^* = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* \qquad (18-31)$$

ويجب أن نلاحظ أن المؤثر H ، وكونه مصفوفة ، يؤثر فقط في ψ وليس في ψ^* .
وبأخذ المعادلة القرينة لـ (18−30) ومن ثم ضربها ب ψ من اليسار ، نتوصل الى :

$$\psi\psi^*\mathsf{H} = -i\hbar\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \qquad (18-32)$$

ويُسفر طرح هذه المعادلة من المعادلة (18−31) عن العلاقة التالية :

$$H\psi\psi^* - \psi\psi^* H = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi\psi^*) \qquad (18-33)$$

واذا أخذنا الآن المتوسط التجمُّعي واستخدمنا المعادلة (18−9) سنجد أن :

$$H\rho - \rho H = [H, \rho] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho \qquad (18-34)$$

(يشير القوسان هنا الى المبادل . وليس الى المتوسط التجمعي). ويجب ان نلاحظ أن هذه المعادلة تختلف بالاشارة عن معادلة حركة ملحوظ ضمن تمثيل هايزنبرغ . وكذلك تكون ρ في تمثيل هايزنبرغ عبارة عن ثابت ، والمعادلة (18−34) لاتتحقق . واذا كُتِبَت هذه المعادلة من خلال مركباتها ، ووفقاً للتمثيل الموضعي ، فستكون كالآتي :

$$\int [H(x, x'')\rho(x'', x') - \rho(x, x'')H(x'', x')]\, dx'' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho(x, x') \qquad (18-35)$$

تعطي المعادلة (18−34) المعادلة الدقيقة لحركة القيمة المتوسطة للملحوظ ، ويمكن رؤية ذلك من خلال الحسابات :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\,\mathrm{tr}\, Q\rho &= \mathrm{tr}\, Q \frac{\partial}{\partial t}\rho = -\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{tr}\, Q[H, \rho] \\ &= -\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{tr}\,[QH\rho - Q\rho H] = -\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{tr}\,[(QH - HQ)\rho] \\ &= \mathrm{tr}\,\{Q, H\}\rho \end{aligned} \qquad (18-36)$$

حيث يشير $\{Q, H\}$ الى قوس بواسون بين Q و H . وقد استخدمنا مرةً أخرى في السطر الثاني من المعادلة الواردة أعلاه كون أثر الجداء المصفوفي يبقى لا تغيُّرياً إزاء الترتيب الذي يُؤخذ الجداء وفقاً له .

18−4 التجمُّعات النظامية والتجمّعات اللانظامية

تبرز خلال مناقشة الكثير من المسائل الاحصائية الحاجة الى قياس مقدار

الانتظام أو اللاانتظام في التجمُّع . وهناك كمية تقدِّم قياساً كمياً مناسباً ، هي :

$$\sigma \equiv -\mathrm{tr}\,\rho \ln \rho \qquad (18-37)$$

فالتجمع يوجد في حالته الأرقى نظاماً ، وذلك حين تكون كل عناصره في الحالة الصافية نفسها ، أي حين تتحقق المعادلة (13–18) . في هذه الحالة ، من السهل رؤية أن $\sigma = 0$. من ناحية اخرى ، تؤدي المعادلة (18–18)، في حالة العشوائية التامة ، الى

$$\sigma = -\ln\left(\frac{1}{N}\right) = +\ln N \qquad (18-38)$$

حيث N هو عدد الحالات الكمية الممكنة ، مما يفترض أن مصفوفة الكثافة لها القياس $N \times N$. كما سنبينٌ لاحقاً ، تشكل هذه الحالة الحد الأعلى بالنسبة لـ σ . إن حالة العشوائية التامة يجب أن تعًد ، في سياق أي تعريف معقول للانتظام ، حالة الحد الأعظمي من اللاانتظام . وبما أن أي ابتعاد من قبل التجمع عن حالة العشوائية التامة يمكنه فقط أن يُنقِص σ ، فان σ ، المعرًفة في المعادلة (37–18) هي قياس كمي ملائم للانتظام في التجمع .

اذا كانت كل عناصر التجمع خاضعة للتشويش نفسه ، فان σ تبقى دون تأثُّر . لنفترض ، مثلاً ، أن القوى ، التي يحددها مؤثر هاملتون المستقل زمنياً $\mathbf{H}$ ، تؤثر في النظم الداخلة ضمن التجمع لفترة زمنية هي H . بناءً على المعادلة (56–13)، تتحول الدالة الموجية $\psi(0)$ لكل نظام الى :

$$\psi(\tau) = \exp\left(-\frac{i\mathbf{H}\tau}{\hbar}\right)\psi(0) \qquad (18-39)$$

وذلك بسبب المفاعلة . اذا عوضنا هذه المعادلة في (9–18) ، سنجد أن المفاعلة تحوٍّل مصفوفة الكثافة الى :

$$\rho(\tau) = \exp\left(-\frac{i\mathbf{H}\tau}{\hbar}\right)\rho(0)\exp\left(\frac{i\mathbf{H}\tau}{\hbar}\right) \qquad (18-40)$$

وهذا ما يشكل تحويلاً واحدياً لـ ρ . إذا كان مؤثر هاملتون مستقلاً عن الزمن ، يمكن تجزئته الى متتالية (لانهائية) من المقاطع المستقلة زمنياً . عندئذٍ يكون التحويل الاجمالي جداء تلك التحويلات الواحدية ، وهو ايضاً واحدي . لكن ، وكما سبق

النقاش في الفصل الثالث عشر، يبقى أثر المصفوفة لا تغيُّرياً ، إزاء التحويل الواحدي . وبالنتيجة ، تبقى σ دون تأثّر من جراء التشويش الذي يطرأ على كل أعضاء التجمع . وبالتالي ، من المستحيل ادخال الانتظام أو اللاانتظام الى تجمُّع ما ، من خلال التأثير في كل عضو من أعضائه بوساطة مجال القوة نفسه .

لكن ، إذا جرى التأثير في أعضاء تجمع ما بقوى مختلفة ، يظهر ـ عادةً ـ ميل نحو المزيد من اللاانتظام في التجمع . بوسعنا رؤية ذلك ، اذا درسنا أولاً الحالة الخاصة لتجمُّع ممثّل بوساطة التمثيل الطاقي ، عبر مصفوفة الكثافة المستقرة

$$\begin{aligned} \rho_{nn} &= 1, \\ \rho_{lm} &= 0, \qquad l \neq m \quad \text{or} \quad l = m \neq n \end{aligned} \tag{18-41}$$

إن كل أعضاء هذا التجمع تشغل الحالة الطاقية n . والآن سندرس تأثير التشويش اللحظي ، الذي يطرأ في لحظة $t = t_0$ في جميع أعضاء التجمع . يمكن تصوير هذا التشويش عبر تأثيره في التجمع ، بوساطة التحويل الواحدي

$$\mathbf{U}\rho(t_0)\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}\rho(t_0)\mathbf{U}^{*} = \rho'(t_0) \tag{18-42}$$

اذا كان العمود رقم n من المصفوفة $\mathbf{U}$ له العناصر . . . . a_1, a_2 ، فستكون ρ' على الشكل

$$\rho'(t_0) = \begin{bmatrix} |a_1|^2 & a_1\overline{a_2} & a_1\overline{a_3} & \cdots \\ a_2\overline{a_1} & |a_2|^2 & a_2\overline{a_3} & \ddots \\ a_3\overline{a_1} & a_3\overline{a_2} & |a_3|^2 & \cdots \\ \vdots & & & \end{bmatrix} \tag{18-43}$$

حيث :

$$\sum_j |a_j|^2 = 1 \tag{18-44}$$

وتمثل المعادلة (18-43) مصفوفة الكثافة في لحظة $t = t_0$ ، وذلك بعد وقوع التشويش . وفي وقت لاحق ، تتكون مصفوفة الكثافة من العناصر التالية :

$$\rho'_{ij}(t) = a_i\overline{a_j} \exp\left[i\omega_{ij}(t - t_0)\right], \tag{18-45}$$

حيث :

$$\omega_{ij} \equiv \frac{E_i - E_j}{\hbar} \qquad (18-46)$$

لنتصور الآن أن أعضاء التجمع المختلفة قد تعرَّضت للتشويش في أوقات مختلفة ، وأن التشويشات موزَّعة عشوائياً خلال الزمن . فمثل هذا التشويش يُسمى عشوائياً . ويتم الحصول على عناصر مصفوفة الكثافة الناجمة بعده وذلك من المعادلة (18-45) بوساطة حساب المتوسط للفترة t_0 ، حيث أن العناصر غير القطرية كافة تساوي الصفر في متوسطها ، وذلك نظراً لعدم تفكك الحالات الطاقوية . واذا كان هناك ثمة تفككات ، فانها سوف تتشعَّب بسبب التشويشات الأخرى ، مما سيقود الى الاستنتاجات نفسها بشكل عام .

يُنتج التشويش العشوائي ، الذي يطرأعلى مختلف أعضاء التجمع ، تجمعاً مستقراً جديداً ، حيث يتوصف الأخير بوساطة مصفوفة قطرية في التمثيل الطاقوي . وعليه ، فانه بوسعنا دراسة الأعضاء المعزولة في التجمع على أنها توجد ضمن حالات طاقوية محددة ، ويمكن القول إن تشويشات عشوائية كهذه تنجم عن انتقالات بين مستويات طاقوية مختلفة طالما أن توصيف مصفوفات الكثافة الكامل ممكن عبر أعداد الانشغال المنسوبة إلى المستويات الطاقوية المختلفة .

أما إذا كانت مصفوفة الكثافة ρ الأصلية ، والتي تصف النظام ، قطرية في التمثيل الطاقوي ، فمن الممكن تجزئتها إلى مصفوفات من الشكل (18-41) . فنحن نرى من المعادلة (18-43) أن ρ ، وبعد سلسلة من التشويشات العشوائية ، تؤول الى ρ' ذات العناصر :

$$\rho'_{kk} = \rho_{kk} + \sum_l C_{kl}(\rho_{ll} - \rho_{kk}) \qquad (18-47)$$

إن $C_{kl} = C_{kl}$ تمثل هنا احتمالية الانتقال (الموجبة) بين الحالتين K و ℓ ، وذلك بسبب التشويش . ويجب أن نلاحظ أن كل حد في المجموع ، الذي تتضمنه هذه المعادلة ، يعمل على زيادة ρ_{kk} اذا كان $\rho_{ll} > \rho_{kk}$. وكذلك ، فإن ρ_{ll} تنقص ، عندئذٍ ، بالمقدار ذاته ، وذلك نظراً للحد الموافق ضمن ذلك المجموع . ويجب أن نلاحظ أيضاً أن المجموع :

$$\sigma_k + \sigma_l \equiv -(\rho_{kk} \ln \rho_{kk} + \rho_{ll} \ln \rho_{ll}) \qquad (18-48)$$

ينقص بسبب انتقال النظم من الحالة ℓ الى الحالة k (حين يكون $\rho_{\ell\ell} > \rho_{kk}$) .
وعليه ، بوسعنا أن نرى ، ومن خلال تكرار الحجج الواردة أعلاه ، أن مرتبة المَعْلَم تزداد نتيجة التشويشات العشوائية ، أي بعد التشويشات العشوائية ، حيث إن :

$$\sigma' = -\,\mathrm{tr}\,\boldsymbol{\rho}' \ln \boldsymbol{\rho}' \geq o \qquad (18-49)$$

بمعنى أن **التشويشات العشوائية تُدخِل اللاانتظام الى التجمع** . وأنه لمن المعقول الافتراض بأن المفاعَلات ، التي تجري بين أي نظام فيزيائي وخزان حراري ما ، تستدعي مثل تلك التشويشات العشوائية التي تُزيد σ .

اذا كان تشويش عشوائي مفرد يتمخض فقط عن تغيُّر صغير في ρ ، فانه يمكن كتابة المعادلة (47−18) على شكل المعادلة التفاضلية :

$$\frac{d\rho_{kk}}{dt} = \sum_{l} B_{kl}(\rho_{ll} - \rho_{kk}) \qquad (18-50)$$

والتي يمكن معرفتها بمثابة معادلة الانتشار . ويبيِّن حل هذه المعادلة أن « انتشار » أعضاء التجمع بين مختلف الحالات الطاقوية يجري حتى تتساوى أعداد الانشغال بين كل المستويات الطاقوية التي تترابط بوساطة التشويشات ، والتي لاتساوي B_{kl} لأجلها الصفر : $B_{kl} \neq 0$. (وفقط تحت هذا الشرط تتلاشى المشتقات الزمنية في المعادلة (50−18) . وهكذا ، نجد أن النظم ، التي تحقق المعادلة (50−18)، تميل الى الاقتراب من التوزيع العشوائي في المعادلة (18−18) ، وذلك حين تتعرض لسلسلة من التشويشات العشوائية .

تُبيِّن مناقشتنا الواردة أعلاه لسلوك مَعْلَم النظام σ أن هذا النظام مرتبطٌ بمتغير **الاعتلاج** الخاص بحالة التحريك الحراري . وفي الواقع ، يمكن تبيان(*) أن التعريف الملائم بالنسبة للاعتلاج في ميكانيك الكم هو :

$$S \equiv k\sigma \qquad (18-51)$$

حيث : k ـ ثابت بولتزمان .

(5−18)التجمعات المستقرة .

إن مصفوفة الكثافة (18−18) الخاصة بالتجمع العشوائي تماماً تتناسب

(*) R. C. Tolman, *Principles of Statistical Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 1st ed., 1938, Chapter 13.

طرداً مع مصفوفة التطابق ، ولذلك ، فانها تتميز بتلك الخاصة الفريدة التي تتلخص في كون المصفوفة تتبادل مع كلٍّ من مؤثرات هاملتون أياً كانت ، ولذلك ، فالتجمع مستقر دائماً . وهذا يعني أنه لايوجد ، وكما ذكرنا سابقاً ، طريقة لادخال الانتظام الى نظامٍ ما ، وذلك من خلال تأثير مجال القوة ذاته في جميع أعضاء مثل هذا التجمع العشوائي . ويقع النظام ، الذي يتوصف بوساطة مصفوفة كثافة مستقرة ، في حالة (أو يخضع لشرط) **التوازن** ، فالشرط اللازم والكافي لأن تكون حالة ما مستقرة هو التبادل بين ρ ومؤثر هاملتون . والشرط الكافي هو أن تكون ρ دالة تابعة لـ H :

$$\rho = \rho(H) \qquad (18-52)$$

تتمتع التجمعات المستقرة بأهمية خاصة لجهة النظم التي تتفاعل مع خزان حراري . فنظم كهذه تقارب الحالة المستقرة التي تتميز بدرجة حرارة مساوية درجة حرارة الخزان . والتطبيق الهام الآخر للتجمع المستقر هو تمثيل النظام الذي نعرف عنه قيمة طاقته فقط . فاذا كان هناك الكثير من الحالات التي تتميز بالطاقة نفسها ، فمن المعقول إعطاء كلٍّ من تلك الحالات المقدار نفسه من الاحتمالية المسبَقة . وعندئذٍ ، تتمتع مصفوفة الكثافة بعناصر قطرية متساوية فيما بينها ومتميزة عن الصفر فقط لأجل هذه الحالات الطاقوية . وعلى نحو مماثل ، يمكن عدُّ النظام ، الذي لاتتوافر حوله أية معلومات ، موجوداً في الحالة العشوائية تماماً ، وقد سبق لنا أن وصفناها . وتملك جميع هذه التجمعات مصفوفات كثافة مستقرة تتبادل مع مؤثر هاملتون .

إن نوع التجمعات المستقرة الذي يحظى بالاهتمام الرئيس هنا ، هو التجمعات ذات الحد الأعظمي من اللاانتظام ، وسوف ندرس عدة من أصناف هذا النوع : التجمع العشوائي تماماً والتجمع القانوني المجهري والتجمع القانوني والتجمع القانوني الكبير .

يُعرَّف **التجمع العشوائي تماماً** ، والذي نوقش سابقاً ، على أنه التجمع الذي تكون جميع الحالات الطاقوية بالنسبة له متساوية الطاقة . وبشكل آخر ، يمكن تعريفه على أنه الحالة التي تكون σ فيها ذات قيمة أعظمية دون أية شروط فيزيائية إضافية . وعليه ، يُعرَّف هذا التجمع من خلال المطالبة بمساواة التغيُّر $\delta\sigma$ للصفر

$$\delta\sigma = \delta\,(\mathrm{tr}\,\rho \ln \rho) = 0 \qquad (18-53)$$

والشرط الاضافي الوحيد ، المفروض على التغير المذكور ، هو :

$$\mathrm{tr}\,\rho = 1 \qquad (18-54)$$

لأجل مصفوفات الكثافة القطرية ، التي هي قيد البحث ، نجد أن :

$$\delta\sigma = \delta \sum_j \rho_{jj} \ln \rho_{jj} = \sum_j \delta\rho_{jj} (\ln \rho_{jj} + 1) = 0 \qquad (18-55)$$

إن التغيُّرات $\delta\rho_{jj}$ اختيارية ، وهي تخضع فقط للشرط :

$$\sum_j \delta\rho_{jj} = 0 \qquad (18-56)$$

وهو الشرط الاضافي الذي يمكن إدخاله بوساطة عوامل لاغرانج . واذا ضربنا المعادلة (18-56) بثابت λ ، وأضفناها الى المعادلة (18-55) ، فستكون النتيجة ، ولأجل أي λ ، هي :

$$\sum_j \delta\rho_{jj} [\ln \rho_{jj} + 1 + \lambda] = 0 \qquad (18-57)$$

بوسعنا أن نختار λ ، بحيث نجعل أياً من الحدود المحاطة بقوسين في هذه المعادلة يساوي الصفر ، وعندئذٍ ، يجب على جميع الحدود الأخرى المحاطة بقوسين أن تساوي الصفر ، ذلك لأن التغيُّرات $\delta\rho_{jj}$ المتبقية يجب أن تتغير بشكل مستقل . لهذا ، فان :

$$\ln \rho_{jj} = \text{constant} \quad (\text{ثابت}) \qquad (18-58)$$

مما يقود حالاً الى مصفوفة الكثافة الخاصة بالتجمع العشوائي تماماً أي المصفوفة (18-18) .

ويعرف **التجمع القانوني المجهري** على أنه التجمع الذي تكون σ فيه أعظميةً ، شريطة أن يتمتع جميع أعضاء التجمع بطاقات تقع ضمن نطاق طاقوي ضيق . ويمكن استخدام مثل هذا التجمع لتوصيف حالة الغاز الذي نعرف عنه فقط طاقته الاجمالية . إن التجمع القانوني المجهري ، ومن الناحية الشكلية ، هو ذلك التجمع الذي تكون σ أعظمية فيه ، شريطة أن تكون العناصر المتميزة عن الصفر في ρ هي فقط تلك التي تقع ضمن النطاق الطاقوي المعيَّن . وتكون المعادلات (53-18) — (58-18) صالحة شريطة أن يتم تفسير المجاميع على أنها تجري فقط ضمن النطاق الطاقوي آنف الذكر . وبالتالي ، يكون التجمع القانوني المجهري

ـ وبناءً على المعادلة (18−58) ـ هو ذلك الذي تمتلك مستوياته الطاقوية وضمن النطاق المحدد ، أعداد انشغال متساوية .

ويُعرَّف **التجمع القانوني** على أنه التجمع الذي تكون فيه σ أعظمية ، شريطة أن تتخذ طاقته المتوسطة قيمةً ما محددة مسبقاً . ويكون التجمع القانوني مفيداً لوصف التجمع ، الذي سُمِح لأعضائه أن تتفاعل مع خزان حراري درجة حرارته تساوي T ، حيث إن الطاقة المتوسطة لهذا التجمع ، وبعد أن ينشأ التوازن ، تتوقف على تلك الحرارة ؛ وبالتالي ، فان :

$$\delta\sigma = \delta \, \mathrm{tr}\, \boldsymbol{\rho} \ln \boldsymbol{\rho} = 0 \qquad (18-59)$$

شريطة أن تتحقق العلاقتان التاليتان :

$$\mathrm{tr}\, \boldsymbol{\rho} = 1, \qquad \mathrm{tr}\, \mathsf{H}\boldsymbol{\rho} = [E] \qquad (18-60)$$

ومرةً أخرى ، يمكن أخذ هذين الشرطين الاضافيين بالحسبان من خلال تقنية عوامل الجداء . ويكون التعبير النهائي ، عندئذٍ ، هو :

$$\sum_j \delta\rho_{jj} \left[\ln \rho_{jj} + 1 - \ln A + \lambda E_j\right] = 0 \qquad (18-61)$$

حيث : A و λ — ثابتان . ومن جديد ، تتلاشى جميع الحدود المحاطة بقوسين ، فنحصل على :

$$\rho_{jj} = A \exp(-\lambda E_j) \qquad (18-62)$$

اذ يتوجب اختيار الثوابت ، بحيث تتحقق المعادلة (18−60) . أضف الى ذلك أنه يمكن الربط بين الطاقة المتوسطة وحرارة الخزان الحراري ، وبغية انجاز ذلك سندرس تجمعاً من المتذبذبات وحيدة البعد . فعندئذٍ ، تكون الطاقة المتوسطة كالتالي :

$$\begin{aligned}
[E] = \mathrm{tr}\, \mathsf{H}\boldsymbol{\rho} &= \sum_j E_j \rho_{jj} = \sum_j (j + \tfrac{1}{2})\hbar\omega A \exp\left[-\lambda(j + \tfrac{1}{2})\hbar\omega\right] \\
&= -\hbar\omega A \frac{d}{d(\lambda\hbar\omega)} \sum_{j=0}^{\infty} \exp\left[-(j + \tfrac{1}{2})\lambda\hbar\omega\right] \\
&= -\hbar\omega A \frac{d}{d(\lambda\hbar\omega)} \frac{\exp(-\lambda\hbar\omega/2)}{1 - \exp(-\lambda\hbar\omega)} \qquad (18-63) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} A \frac{\exp(\lambda\hbar\omega/2) + \exp(-\lambda\hbar\omega/2)}{[\exp(\lambda\hbar\omega/2) - \exp(-\lambda\hbar\omega/2)]^2}
\end{aligned}$$

ويمكن كتابة المعادلة الأولى في (60−18) ، ولأجل تجمع المتذبذبات وحيدة البعد ، كالآتي :

$$1 = \sum_j A \exp [-(j + \tfrac{1}{2})\lambda\hbar\omega] = A \frac{\exp(-\lambda\hbar\omega/2)}{1 - \exp(-\lambda\hbar\omega)} \qquad (18-64)$$

واذا عوضنا هذه النتيجة في المعادلة (63−18) ، سنجد أن :

$$\begin{aligned}[E] &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega \frac{\exp(\lambda\hbar\omega/2) + \exp(-\lambda\hbar\omega/2)}{\exp(\lambda\hbar\omega/2) - \exp(-\lambda\hbar\omega/2)} \\ &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp(\lambda\hbar\omega) - 1}\end{aligned} \qquad (18-65)$$

وفي النهاية المتمثلة بالترددات المتدنية جداً ، تؤول هذه العلاقة الى :

$$[E] \xrightarrow[\omega \to 0]{} \frac{1}{\lambda} \qquad (18-66)$$

ولكن النتائج الكلاسيكية ، التي تنطبق على هذه النهاية ، وبناء على الاحصائيات الكلاسيكية ، تفيد بأن :

$$[E] = kT \qquad (18-67)$$

ولهذا ، فان :

$$\lambda = \frac{1}{kT} \qquad (18-68)$$

تبدو هذه النتيجة ، وللوهلة الأولى ، بالغة المحدودية في صلاحياتها ، وذلك من حيث كونها مقتصرة على المتذبذبات التوافقية متدنية التردد ، ولكن من السهل رؤية كونها عامة تماماً . لنأخذ مثالاً يتألف من نظامين جزئيين ، وليكن أحد هذين النظامين الجزئيين متذبذباً خطياً متدني التردد . ويمكن عدُّ النظام الاجمالي إما نظاماً مفرداً أو تركيباً من نظامين مستقلين . ففي الحالة الأولى ، تكون نتائج المعادلتين (67−18) و (68−18) صالحة لأجل المتذبذب . ولكن اذا افترضنا النظام مركباً ، فهنالك ثابت λ واحد مُعرَّف بالمعادلة (68−18) لأجل هذا النظام .

وكخلاصة ، يكون التجمع القانوني هو التجمع الذي يكون انشغال الحالة الطاقوية فيه متناسباً طرداً مع عامل بولتزمان $\exp(-E_i/kT)$. واذا عوضنا هذه

النتيجة في المعادلة (18−60) ، فإنه يمكن حساب الطاقة المتوسطة في ظل درجة الحرارة T لأجل أي نظام .

غالباً ما يكون العدد الاجمالي للجسيمات في النظام غير معروف ، وذلك كما في حالة الغاز مثلاً . وبالتالي ، من المناسب أحياناً دراسة صنف آخر تماماً من التجمعات المستقرة ، وهو التجمع الذي يختلف أعضاؤه من حيث العدد الاجمالي للجسيمات . فاذا أدخلنا العدد الاجمالي للجسيمات ، شكلياً ، بمثابة متغير حركي ذي مؤثر N يتخذ القيم المميزة . . . . ,3 ,2 ,1 ,0، سنجد أن هذا العدد الاجمالي للجسيمات ـ وفي النظم اللانسبية قيد البحث ـ هو ثابت حركة . لهذا ، فإن N يتبادل مع مؤثر هاملتون ، ويمكن أخذ مصفوفة الكثافة لتكون قطرية بالنسبة لـ H و N في آن واحد . وعلى نحو مماثل لما كان في حالة التجمع القانوني ، يمكن أن نجعل مَعْلَم عدم الانتظام أعظمياً شريطة أن تتخذ الطاقة وعدد الجسيمات ، كلاهما ، قيمة متوسطة تُحدَّد مسبقاً :

$$\delta\sigma = \delta\,(\mathrm{tr}\,\boldsymbol{\rho}\ln\boldsymbol{\rho}) = 0 \qquad (18-69)$$

شريطة أن :

$$\mathrm{tr}\,\mathsf{H}\boldsymbol{\rho} = [E], \qquad \mathrm{tr}\,\mathsf{N}\boldsymbol{\rho} = [N], \qquad \mathrm{tr}\,\boldsymbol{\rho} = 1 \qquad (18-70)$$

وعليه ، فإن :

$$0 = \mathrm{tr}\,[\ln\boldsymbol{\rho} + \lambda\mathsf{H} + \nu\mathsf{N} - \ln A]\,\delta\boldsymbol{\rho} \qquad (18-71)$$

و:

$$\boldsymbol{\rho} = A\exp(-\lambda\mathsf{H} - \nu\mathsf{N}) \qquad (18-72)$$

حيث : A و λ و ν — ثوابت . إن $\boldsymbol{\rho}$ قطرية في التمثيل الذي تكون فيه المصفوفات **H** و **N** قطريتين بآن واحد ، والتجمع ، الذي يتمثل بمصفوفة كثافة من الشكل (18−72) ، يُعرَف باسم **التجمع القانوني الكبير** .

18 − 6 نُظُم الجُسَيْمات غير المتفاعِلة .

سبق أن تحدثنا في الفصل السابع عشر عن أن هناك ثمة تأثيرات هامة وكبيرة تنشأ عن متطلبات التناظر المفروضة على نظام يتكون من جسيمات غير قابلة للتمييز . وسوف نعالج في هذه الفقرة نظاماً من جسيمات لاتتفاعل فيما بينها ضمن افتراضات

متبدلة ، مثلاً : الجسيمات قابلة للتمييز ؛ الجسيمات هي جسيمات بوزيه ؛ الجسيمات هي جسيمات فيرمي .

وفي البداية ، سنفترض أن الجسيمات قابلة للتمييز . إن نظاماً يتألف من جسيمات متكافئة على الأصعدة الأخرى ـ ولكنها قابلة للتمييز ـ يُسمى **نظام بولتزمان** أو نظاماً خاضعاً لاحصائيات بولتزمان . وسوف نرمز الى المستويات الطاقوية للجسيم المفرد في هذا النظام بالطاقات E_i غير المفككة . وعندئذٍ ، تكون الطاقة الاجمالية :

$$E = \sum n_i E_i \qquad (18-73)$$

حيث : n_i عدد الجسيمات ذات الطاقة E_i . والطاقة E هي المستوى الطاقوي لغاز يُعالَج بمثابة نظامٍ معزول ، وهي تنطوي على تفكك قدره :

$$g_E = \frac{N!}{\prod_i n_i!} \qquad (18-74)$$

حيث :

$$N = \sum_i n_i \qquad (18-75)$$

وهذا التفكك ناجم عن أن تبديلات N جسيماً ، وعددها $N!$ تبديلاً ، تقود الى حالات طاقوية مختلفة لأجل الغاز ككل ، باستثناء تلك التبديلات التي تسفر عن تبديل الجسيمات ضمن الحالة الطاقوية E_i المفردة ذاتها .

ولأجل حساب القيمة المتوسطة لـ n_i ، بوسعنا استخدام التجمع القانوني ، فعندئذٍ ، يمكن كتابة القيمة المتوسطة من خلال استخدام المعادلات (18−62) و (18−68) و (18−74) ، وذلك على النحو التالي :

$$[n_i] = \frac{1}{Z} \sum \frac{N!}{\prod_j n_j!} n_i \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \qquad (18-76)$$

حيث تسري عملية الجمع على جميع الجُمَل الممكنة من قيم n_j ، وذلك ضمن شرط المعادلة (18−75) ، وتسمى الكمية Z **المجموع الساري على الحالات** ، أو **دالة التجزئة** ، وهي تعطى بالعلاقة التالية :

$$Z \equiv \sum \frac{N!}{\prod_j n_j!} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \qquad (18-77)$$

مرةً أخرى ضمن شرط للمعادلة (18−75) مفروض على المجموع $\sum$. ويجب أن نلاحظ أن (18−76) تشكل مجرد جمع يشمل كل القيم الممكنة لـ n_i ، حيث تُضرَب كل منها باحتمالية ظهور قيمة محددة . ونظراً لتفكك المستوى الطاقوي :

$$E = \sum_i n_i E_i \qquad (18-78)$$

فإن عامل بولتزمان في المعادلة (18−62) يجب أن يُضرَب بعامل التفكك (74−18) إذا أردنا للجمع أن يشمل جميع الحالات المتمثلة بخيار معين لأعداد الإشغال n_1 وn_2 . . . .

ويمكن تقدير دالة التجزئة Z بشكل واضح لو لاحظنا أن نشرها باستخدام كثير حدود سيسفر عن :

$$Z = \left[\exp\left(-\frac{E_1}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{E_2}{kT}\right) + \cdots\right]^N \qquad (18-79)$$

ويجب أن نلاحظ أيضاً أن المعادلة (18−76) يمكن أن تُكتَب على الشكل التالي :

$$[n_i] = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial(E_i/kT)} = -\frac{\partial\,(\ln Z)}{\partial(E_i/kT)} \qquad (18-80)$$

$$= N\,\frac{\exp\,(-E_i/kT)}{\sum_j \exp\,(-E_j/kT)}$$

وهذه النتيجة مطابقة لتلك التي يتم الحصول عليها عندما نفترض النظام مكوناً من N جسيماً مفرداً لاتتفاعل فيما بينها ، ونطبق المعادلة (18−62) مباشرةً على نظم الجسيمات المفردة . وهكذا ، فإن من الواضح أننا قد استخدمنا شكلانيةً معقدة للحصول على نتيجة بسيطة . فالقيمة الحقيقية لهذه التقنية تظهر فقط إذا أُخِذ بالحسبان عدم قابلية الجسيمات للتمييز .

والآن ، لنأخذ حالة الجسيمات غير القابلة للتمييز والخاضعة لاحصائيات بوزيه . إن أي تبديل للجسيمات يقود الى تغير في الدالة الموجية ؛ فالحالة المستقرة تتوصف بشكل كامل بوساطة الأعداد الكمية n_i ؛ وهي حالة غير مفككة . لذلك ، يجب أن يُستعاض عن عامل التفكك (18−74) ، ولأجل جسيمات بوزيه ، بعامل يساوي الواحد . ومرةً أخرى ، سوف نحسب القيمة المتوسطة $[n_i]$ ، لكنه من غير الملائم استخدام التجمع القانوني ، وذلك نظراً لأن الجمع الناجم صعب التقدير .

لهذا ، فإننا نستخدم التجمع القانوني الكبير (72−18) ، مما يؤدي ، وعوضاً عن المعادلة (76−18) ، الى :

$$[n_i] = \frac{1}{Z} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots n_i \exp\left(-\frac{E}{kT} - \nu N\right), \qquad (18-81)$$

حيث :

$$Z \equiv \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \exp\left(-\frac{E}{kT} - \nu N\right),$$

$$E \equiv \sum_i n_i E_i, \qquad (18-82)$$

$$N \equiv \sum_i n_i$$

أما دالة التجزئة ، فيمكن كتابتها كالآتي :

$$Z = \prod_i \sum_{n_i=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n_i E_i}{kT} - \nu n_i\right)$$
$$= \prod_i \frac{1}{1 - \exp\left[-(E_i/kT) - \nu\right]} \qquad (18-83)$$

ومرةً أخرى :

$$[n_i] = -\frac{\partial \ln Z}{\partial (E_i/kT)} = \frac{1}{\exp\left[(E_i/kT) + \nu\right] - 1} \qquad (18-84)$$

والثابت لايتحدد بحكم الشرط :

$$[N] = \sum_i [n_i] = \sum_i \frac{1}{\exp\left[(E_i/kT) + \nu\right] - 1} \qquad (18-85)$$

يتحقق في ظل احصائيات فيرمي مبدأ استبعاد باولي ، بمعنى أن الدالة الموجية تغير إشارتها بعد أي تبديل وتري ، بينما يمكن لأعداد الإشغال n_i أن تساوي فقط الصفر أو الواحد . ومرةً أخرى ، تضمن هذه الأعداد التوصيف الكامل للحالة والتفكك يساوي الواحد . فاذا استخدمنا التجمع القانوني الكبير ، نجد أن :

$$[n_i] = \frac{1}{Z} \sum_{n_1=0}^{1} \sum_{n_2=0}^{1} \cdots n_i \exp\left(-\frac{E}{kT} - \nu N\right) \qquad (18-86)$$

حيث :

$$Z = \sum_{n_1=0}^{1} \sum_{n_2=0}^{1} \cdots \exp\left(-\frac{E}{kT} - \nu N\right) \qquad (18-87)$$

أما دالة التجزئة ، فيمكن كتابتها على النحو :

$$Z = \prod_i \left[1 + \exp\left(-\frac{E_i}{kT} - \nu\right)\right] \qquad (18-88)$$

وعندئذٍ

$$[n_i] = -\frac{\partial \ln Z}{\partial(E_i/kT)} = \frac{1}{\exp[(E_i/kT) + \nu] + 1} \qquad (18-89)$$

كما في حالة احصائيات نظام بوزيه ، يتم تقدير الثابت ν بوساطة الشرط :

$$\sum_i [n_i] = [N] \qquad (18-90)$$

ففي حالة احصائيات فيرمي ، تجري كتابة ν (وهي كمية عديمة القياس) عادةً كالآتي :

$$\nu = -\frac{E_F}{kT} \qquad (18-91)$$

حيث E_F — ما يُعرَف باسم طاقة فيرمي أو مستوى فيرمي ، لأجل النظام . ونستطيع كتابة المعادلات (18−80) و (18−84) و (18−89) ، كلها بالصيغة :

$$[n_i] = \frac{1}{\exp[(E_i/kT) + \nu] + \beta} \qquad (18-92)$$

حيث $\beta = 0, -1, +1$ ، لأجل احصائيات بولتزمان وبوزيه وفيرمي ، على التوالي .

18−7 الغاز المثالي

كمثال على تطبيق الأنواع الثلاثة من الإحصائيات (احصائيات بولتزمان وبوزيه وفيرمي) على نظام الجسيمات ، غير المتفاعلة فيما بينها ، سندرس نظاماً كلاسيكياً هو

الغاز المثالي . قد يبدو غاز بولتزمان غير ذي أهمية فيزيائية ، لأن جزيئات أي غاز هي ، في الواقع ، غير قابلة للتمييز . ولكنه ، قد يوجد نظام ، تتخذ الجسيمات المفردة فيه حالاتٍ داخليةً على درجة كبيرة من التفكك ، كما هو حال الجزيئات ذات زخوم البرم الكبيرة المقترنة بواحد أو أكثر من عناصرها المكوِّنة ، فمثل هذه الجزيئات هي قابلة للتمييز ، تقريباً ، بفضل اتخاذها لاتجاهات برم مختلفة . إن غازاً يتكون من جزيئات كهذه قريب ، إذاً ، من نظام بولتزمان .

إن المعادلة (18−92) قابلة للتطبيق رأساً على حالة الغاز المثالي ، ولكننا نستطيع كتابتها بصيغة ملائمة أكثر ، إذا تم إدخال تفكك الحالات الطاقية للجسيم المفرد ، ضمن صندوق ، على نحو واضح . لقد عولجت حالة الجسيم الواقع في صندوق وحيد البعد ، خلال الفصل الثالث . فاذا قمنا بتعميم النتائج التي حصلنا عليها هناك الى حالة الأبعاد الثلاثة ، ونقلنا بداية الاحداثيات من مركز الصندوق الى احدى زواياه ، تؤول الدالة الموجية للجسيم (عديم البرم)، الواقع ضمن صندوق مكعب ضلعه a ، الى الشكل :

$$\psi_{qrs} = \left(\frac{8}{a^3}\right)^{1/2} \sin\frac{\pi q x}{a} \sin\frac{\pi r y}{a} \sin\frac{\pi s z}{a}, \qquad q, r, s = 1, 2, 3, \ldots \tag{18−93}$$

أما طاقة الجسيم الموافقة ، فتساوي :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(q^2 + r^2 + s^2) \tag{18−94}$$

بما أن المسافات الفاصلة بين المستويات الطاقوية صغيرة جداً لأجل أية قيم معقولة للكتلة m وقياس الصندوق a ، فمن الملائم افتراض أن المستويات الطاقوية موزعة بشكل متصل ، وأن دراسة عدد الحالات الطاقوية $dn(E)$ ، وفي نطاق طاقوي dE ، يتم حول E . ويمكن ايجاد دالة التوزيع من خلال عد المعالم q, r, s (وهي أعداد صحيحة) بمثابة مركّبات لمتجه في الفراغ الزخمي . وإن المعادلة (٩٤ − ١٨) هي معادلة كرة في الفراغ المذكور ، حيث إن ثُمن هذه الكرة ، والذي له قشرة نصف قطرها $R = (a/\pi\hbar)(2mE)^{1/2}$ وثخنها $dR = (a/\pi\hbar)(m/2E)^{1/2}$ ، يملك حجماً $d\nu$ مساوياً عدد الحالات الطاقوية $dn(E)$ ضمن النطاق الطاقوي dE . وهكذا :

$$dn(E) = \frac{1}{8} \times 4\pi R^2\, dR = \frac{m}{2\pi^2}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^3 (2mE)^{1/2}\, dE \qquad (18-95)$$

واذا كان للجسيمات برم يساوي S ، فان هنالك $2s + 1$ اتجاهاً ممكناً للبرم بالنسبة لكل من هذه الحالات الانتقالية ، وعندئذٍ ، تُعطى كثافة الحالة بالمعادلة (18−95) مضروبةً بالعامل($2s + 1$) . وان عدد جسيمات الغاز dN ، والتي تقع ضمن النطاق الطاقوي dE المحيط بـ E ، ينتج من المعادلتين (18−92) و (18−95) :

$$dN = \frac{m}{2\pi^2}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^3 (2mE)^{1/2} \frac{dE}{\exp\left[(E/kT) + \nu\right] + \beta} \qquad (18-96)$$

حيث : $\beta = 0$ أو $\beta = -1$ أو $\beta = +1$ ، ووفقاً للاحصائيات المعتمدة . واذا وُضع تفكك الحالات البرمية في الحسبان وكان برم الجسيمات s ، فان عدد جسيمات الغاز في واحدة الحجم ، وضمن واحدة الطاقة ، يساوي :

$$W(E) = \frac{m(2mE)^{1/2}}{2\pi^2\hbar^3} \frac{2s + 1}{\exp\left[(E/kT) + \nu\right] + \beta} \qquad (18-97)$$

حيث يجب اختيار الثابت ν ، وكما سبق الحديث ، لكي نتوصل الى صيغة دقيقة لكثافة الجسيم .

لابد من الاشارة الى نقطة تتعلق بالمعادلة (18−97) . فمن الواضح أن ν في حالة إحصائيات بوزيه لايمكنها أن تكون سالبة وإلا لأمكن لـ $[n_i]$ أن تكون سالبة ، وذلك انطلاقاً من المعادلة (18−84) . لهذا ، تتوافق الكثافة الأعلى للجسيمات مع حالة $\nu = 0$. ولكن ، لو جعلنا ν مساوية الصفر ، وأجرينا مكامَلة المعادلة (18−97) على جميع الطاقات الممكنة ، فإننا سنحصل على كثافة الجسيمات النهائية . وعندئذٍ ، سيظهر أن الشكلانية التي عرضناها غير قادرة على الحساب الملائم لوضع غازات بوزيه عالية الكثافة . ولكن المشكلة ليست هنا ، فالارتباك ينشأ عن النظر الى دالة التوزيع $W(E)$ الخاصة بكثافة الجسيمات ، وكأنها مرتبطة بمدى متصل من الحالات الطاقوية . ولكن لو افترضنا أن حالات الغاز المثالي متقطعة ، فان المعادلة (18−84) تبين امكان أن تكون كثافة الجسيمات الواقعة فقط

في الحالة الطاقوية الدنيا $E_i = 0$ لانهائية(*) .

واضح من المعادلة (18—97) ، أن ν تقارب اللانهاية ، وذلك حين تقترب كثافة الجسيمات من الصفر . وفي ظل هذا الشرط يجري اختزال دالات التوزيع الثلاث الموافقة لمختلف قيم β على الشكل نفسه . وعليه ، فان التأثيرات المتصلة بعدم قابلية الجسيمات للتمييز ، تصبح هامة فقط في حالات الكثافة العالية للجسيمات ، حيث يلاحَظ ، ومن المعادلة (18—92) ، أنه حين تكون ν كبيرة ؛ وبما يكفي لتسفر عن دالات توزيع متماثلة من حيث الجوهر لأجل الأنواع الثلاثة من الاحصائيات ، أي حين تكون $[n_i] \ll 1$ ، فان $\nu \gg 1$ لأجل جميع قيم i . واذا تكلمنا بلغة الفيزياء ، فان أية تأثيرات هامة تنجم عن تطابق الجسيمات ، وذلك عندما تكون كثافة الجسيمات عالية بما يكفي لتجعل احتمالية العثور على أكثر من جسيم في الحالة الطاقوية نفسها ذات مقدارٍ يُذكَر .

لقد بيَّنا المعادلة (18—92) بالرسم في الأشكال (18—3) — (18—1) لأجل الأنواعِ الثلاثة من الاحصائيات في ظل ثلاث قيم مختلفة لكثافة الجسيمات ، وذلك لكي نُبرِز تأثير الاحصائيات في توزيع جزيئات الغاز المثالي بين الحالات الطاقوية الممكنة بالنسبة لجسيم ضمن صندوق . وقد اخترنا قيم ν بحيث تتوافق كل رسمة مع الكثافة الاجمالية نفسها للجسيمات . وتعطى الأعداد المتوسطة للجسيمات ، والتي تشغل الحالة الطاقوية الأدنى $(E = 0)$ ، في الجدول (18—1) لأجل الأنواع الثلاثة من الاحصائيات . فالشكل (18—1) يوافق الكثافة المتدنية ، ونحن نرى أن تأثيرات عدم قابلية الجسيمات للتمييز يمكن تجاهلها ، باستثناء نطاق الطاقات المتدنية جداً .

أما الشكل (18—2) فيوافق الحالة التي تكون كثافة الجسيمات فيها قد زيدت بـ 10 أضعاف ، ونحن نرى أن تأثيرات تطابُق الجسيمات تبدأ في ظل هذه الكثافة لتصبح محسوسة . ويجب ملاحظة جانبين : هنالك في غاز بوزيه نزعة لدى الحالات الطاقوية الأدنى الى الامتلاء بالمقارنة مع الحالات الطاقوية الأعلى ، بينما تبرز في غاز فيرمي نزعة لدى الحالات الطاقية الدنيا الى قلة الانشغال على نحو غير عادي .

(*) لأجل نقاش أكثر تفصيلاً ، انظر :

(*) E. Schrödinger, *Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press, 1952, Chapter 8.

الجدول 18–1

أعداد الإشغال المتوسطة [n_o] في الحالة الطاقية الدنيا ، لأجل الكثافات الثلاث للجسيمات / في الأشكال (18–1) و (18–3) .

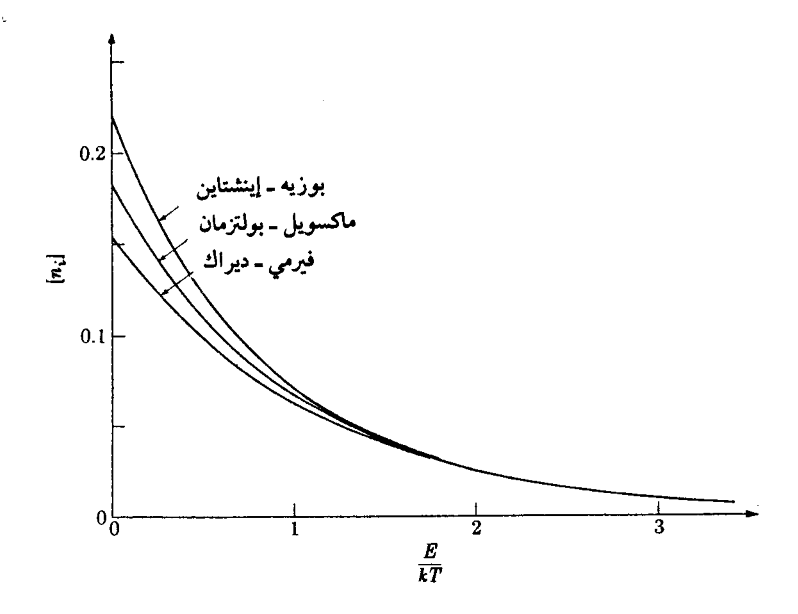
الشكل	نوع الإحصائيات		
	فيرمي - ديراك	بوزيه - إينشتاين	ماكسويل - بولتزمان
1-18	0.153	0.220	0.181
2-18	0.77	15.88	1.81
3-18	1.0	$\sim 0.81N$†	27.1

+ العدد صالح لأجل الكثافات العالية ، وهذا العدد الضخم نموذجي في حالة تكثيف بوزيه .

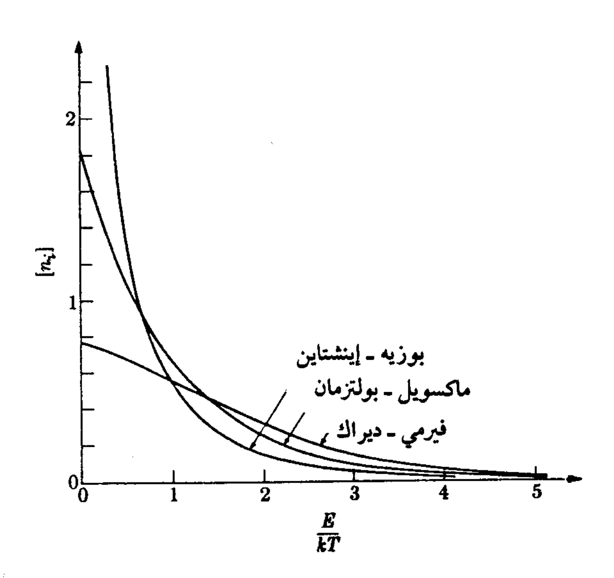
ويعرف التأثير الأول باسم **تكثيف بوزيه** . **ففي ظروف الكثافة العالية (ν صغيرة)**، حيث يجري تكثيف بوزيه بقدر ملحوظ ، تؤدي الزيادة في كثافة الجسيمات ، وحصراً ، الى الازدياد في تركيز الجسيمات متدنية الطاقة ، ولكن ضغط الغاز لايرتفع على نحو يُذكَر . بهذا المعنى ، يكون سلوك غاز بوزيه شبيهاً ، والى حد ما ، بسلوك البخار المشبع : فزيادة كمية المادة تؤدي حصراً الى تنامي الكمية في الطور « المتكثف » للمادة دون ارتفاع فعلي في الضغط . وإن هذا التكثيف مبينٌ ، وعلى نحو بارز أكثر ، في الشكل (18–3)، حيث يوافق هذا التكثيف زيادة جديدة في كثافة الجسيمات بمقدار 15 ضعفاً آخر .

يجب أن نلاحظ أن المَعْلَم ν ليس فقط دالة كثافة الجسيمات ، بل دالة الحرارة أيضاً . ولقد رسمنا الأشكال (18–1) – (18–3) لنبيِّن تأثيرات الزيادة في كثافة الجسيمات في ظل حرارة ثابتة . وتتوافق الهيئة العامة للمنحنيات أيضاً ـ ومن الناحية النوعية ـ مع تأثير **تخفيض** الحرارة ، وذلك حين تكون كثافة الجسيمات ثابتة ، ولكن هذا التوافق لايصح من الناحية الكمية .

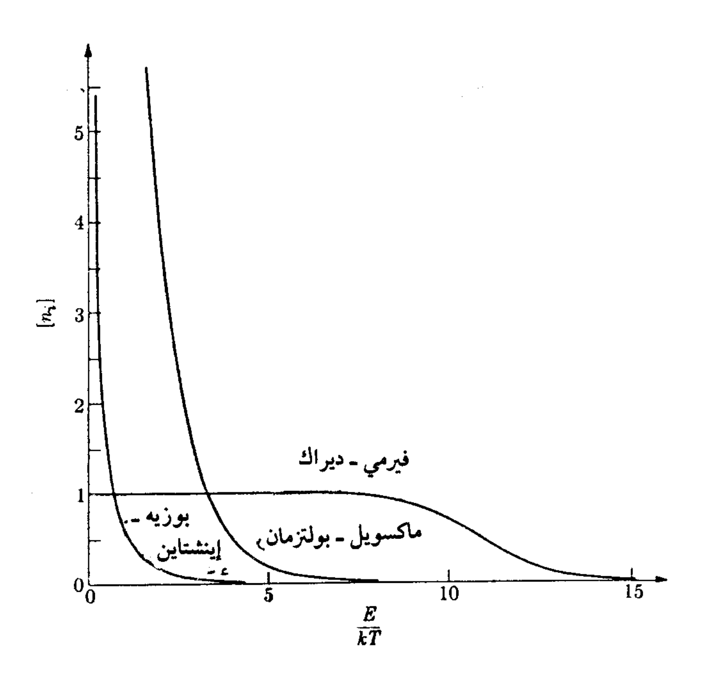
وكمثال أخير على التأثيرات الناجمة عن عدم قابلية الجسيمات للتمييز رسمنا المعادلة (18–97) في الشكل (18–4) وذلك في حالة جسيمات فيرمي ذات البرم 1/2 لأجل قيم ν الثلاث ، التي وردت في الأشكال (18–1) – (18–3).



الشكل **1-18**. القيم المتوسطة التجميعية لأعداد الإشغال $[n_i]$ في مختلف الحالات الطاقوية لجسيم حر ضمن صندوق في حالة غاز مثالي يخضع لإحصائيات: ماكسويل - بولتزمان وبوزيه - إينشتاين وفيرمي - ديراك.



الشكل **2-18**. القيم المتوسطة التجميعية لأعداد الإشغال$[n_i]$، مختلف الحالات الطاقوية لجسيم حر ضمن صندوق في حالة غاز مثالي يخضع لأنواع الإحصائيات الثلاثة. وتساوي كثافة الغاز في هذه الحالة *10* أضعافها في حالة الشكل (1-18). ويجب ان نلاحظ التغير في مقاييس الرسم. هنا يبدأ غاز بوزيه يتكشف عن التكثف في الحالات الطاقوية الأدنى.

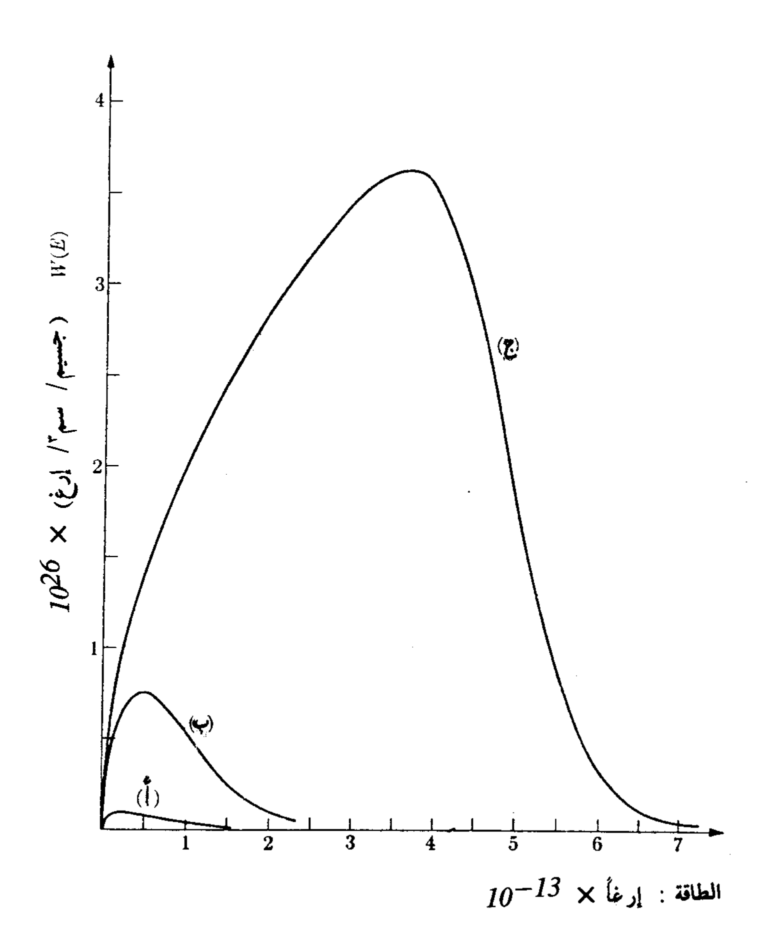


الشكل **3-18**. القيم المتوسطة التجميعية $[n_i]$ لأعداد الإشغال في مختلف الحالات الطاقوية لجسيم حر ضمن صندوق في حالة غاز مثالي يخضع لأنواع الإحصائيات الثلاثة. وتساوي كثافة الغاز في هذه الحالة *150* ضعفاً منها في حالة الشكل **1-18**. وتبدو التأثيرات الأعظمية للتفكك في نظامي فيرمي وبوزيه (أنظر أيضاً الجدول «**1-18**»).

18-8 خلاصة .

لقد اختتمنا هذا المدخل الى ميكانيك الكم بمناقشة ميكانيك الكم الاحصائي . فتمَّ إدخال مفهوم الحالات الخليطة ، التي توافق المعرفة غير الكاملة للنظام ، وتبيان أن دالات التوزيع تضمن التوصيف الفيزيائي الكامل لتجمع النُظُم المتشابهة . كما أدخلنا مفهوم مصفوفة الكثافة ، وبينّا أنها هرميتية وأن أثرها يساوي الواحد . ثم درسنا حالة اتجاهات البرم في تجمع من جسيمات ذات برم 1/2 ، وذلك بمثابة تطبيق بسيط لمصفوفات الكثافة .

كما أدخلنا مفهوم النظام العشوائي ، وناقشنا ، باختصار التجارب الخاصة بتداخل الالكترونات ، وذلك بلغة مصفوفات الكثافة . ثم استخلصنا معادلة الحركة لأجل مصفوفة الكثافة ، وتوصلنا الى تعبير لمعادلة الحركة لأجل ملحوظ بلغة مصفوفة الكثافة أيضاً . كما ناقشنا التجمعات النظامية والتجمعات اللانظامية ، وأعطينا التعريف الكماتي للاعتلاج ، ثم درسنا تجمعات مستقرة مختلفة : التجمع العشوائي والتجمع القانوني المجهري والتجمع القانوني والتجمع القانوني الكبير . ولقد نظرنا في مسألة عدم قابلية الجسيمات للتمييز في النُظُم المكونة من جسيمات لاتتفاعل فيما بينها ، وشرحنا بعضاً من خواص نظام ماكسويل ـ بولتزمان ونظام بوزيه ـ إينشتاين ونظام فيرمي ـ ديراك . وأخيراً ، طبقنا تلك النتائج على الغاز المثالي المحصور في صندوق ، وعرضنا ـ وبمثابة أمثلة ـ بعض الفوارق الفيزيائية المميِّزة للغازات التي تخضع لأنواع مختلفة من الاحصائيات .



الشكل 18 — 4. كثافة الجسيمات ذات البرم $1/2$ في غاز مثالي يخضع لإحصائيات فيرمي ، منسوبة إلى نطاق طاقوي واحدي، وذلك بالمقارنة مع الطاقة في حالات الكثافة الثلاث المبنية في الأشكال (1-18)-(3-18). لقد رسمنا المنحنيات لأجل جُسيمات كتلتها $m = 9.11 \times 10^{-28}$ g غراماً، في ظل درجة حرارة الغرفة ($T = 293°K$) . ويوافق المنحني (أ) الشكل (1-18) في ظل كثافة قدرها $N = 8.78 \times 10^{11}/cm^3$ بينما يوافق المنحني (ب) الشكل (2-18) و $N = 8.78 \times 10^{12}/cm^3$. ويوافق المنحني (جـ) الشكل (3-18). و $N = 1.32 \times 10^{14}/cm^3$.

مسائل

18-1 يمكن توصيف حالة الاستقطاب لدى الفوتون بوساطة دالة موجية على شكل متجه ـ عمود مكون من مركّبتين . (فكما رأينا ، يسلك الفوتون سلوك جسيم برمه $s=1$ ولكن مركّبة هذا البرم $m_s=o$ ، لاتظهر ابداً عندما نختار محوراً للتكمية يطابق اتجاه انتشار الضوء . عندها تتميز حالة الاستقطاب باتساعَيْ الحالتين الجزئيتين $m_s=\pm1$. وفي هذه الحالة يمكن توصيف الحالة الاستقطابية لتجمع الفوتونات (أي لحزمة ضوء مُستقطب جزئياً) بوساطة مصفوفة الكثافة :

$$\rho_{ij} = \langle a_i \overline{a_j} \rangle_{\text{avg}}$$

حيث : $a\pm$ — اتساعا الحالتين $ms = \pm 1$ المُستقطبتين دائرياً . بيِّنْ أن حالة استقطاب الضوء تتطلب عادةً ثلاثة أعداد حقيقية لتوصيفها .

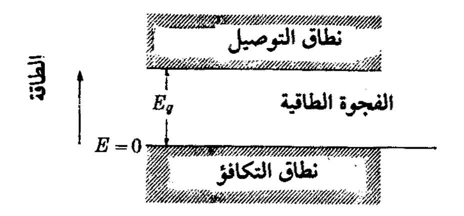
18-2 يتميز الاستقطاب الدائري للفوتون بمؤثر باولي للبرم σ_z المكون من مركّبتين ، وذلك ضمن لغة التمثيل الموصوف في المسألة (18-1) . وعلى نحو مماثل ، يشكل كلٌ من σ_x و σ_y مؤثرين لقياس الاستقطاب المستوي . (وعلى نحو أعم ، يمثل التركيب الخطي لـ σ_x و σ_y جملةً اختيارية من حالات الاستقطاب المستوي المتعامدة). أ) بالمقارنة مع دراستنا لحالات برم الجسيم $s = 1/2$ ، أوجدْ مصفوفة الكثافة لأجل حزمة ضوء غير مُستقطَبة كلياً .
ب) ما هي القيمة المتوسطة لكل من مؤثرات الاستقطاب الثلاثة σ_z , σ_y , σ_x لأجل حزمة الضوء غير المُسقطَبة هذه ؟ ج) احسبْ مَعْلَم اللاانتظام $\sigma = -\text{tr}\,\rho \ln \rho$ لأجل حزمة الضوء غير المستقطبة . د) ما هي قيمة δ لأجل حزمة ضوء كاملة الاستقطاب ؟

18-3 أ) بيِّن أنه يمكن دائماً عدُّ حزمة الضوء ذات الاستقطاب الاختياري على أنها خليط من حزمة ضوئية كاملة الاستقطاب وحزمة ضوئية غير مستقطبة . ب) بيِّنْ أن معلم اللاانتظام σ يتحدد بشكل كامل من خلال كمية الضوء غير المستقطب في هذا الخليط .

18-4 بيِّن أنه يمكن عدُّ حزمة الضوء غير المستقطبة كلياً على أنها خليط من حزمَتَيْ

ضوء كاملتيّ الاستقطاب شدتاهما متساويتان ، ولكن استقطابها متعاكس ، واستقطاب هاتين الحزمتين قد يكون مستوياً أو دائرياً أو اهليلجياً .

5–18 توجد في الجسم الصلب ، وإضافةً الى الكترونات « اللب » ذات الارتباط الوثيق بذراتها الخاصة في الهيكل الشبكي ، الكترونات « التكافؤ » التي تساهم في القوى الكيميائية التي تشد البلورة الى بعضها بعضاً . ولايمكن ربط الكترونات التكافؤ هذه الى ذرات مفردة على نحو وحيد ، بل يجب ربطها بالبلورة ككل . وتشكل الحالات الطاقوية المتاحة لهذه الالكترونات أمداء أو **نُطُقاً** . وفي الكثير من المواد ، تفصل بين بعض هذه النُطُق **فجوات طاقوية** ، حيث لاتوجد حالات متاحة للالكترون (انظر الشكل (5–18)). فاذا كانت الكترونات التكافؤ تملأ جزئياً فقط النطاق الأعلى (**نطاق التوصيل**) ، فاننا نجد الالكترونات سهلة الاثارة نحو الحالات الطاقوية غير المملوءة ، وتبدي البلورة خاصة التوصيل المعدني . أما في العازل ، فان الالكترونات تملأ تماماً ما يسمى **نطاق التكافؤ** من الحالات المتاحة ، وهي غير حرة في أن تنقل الكهرباء ، إلا إذا تمت إثارتها بشدة لتعبُر الفجوة الطاقوية الى نطاق التوصيل الذي يقع في الأعلى .



الشكل $5-18$

في أشباه الموصِلات ، وتحت درجة حرارة الصفر المطلق ، تكون الحالات الطاقوية في نطاق التوصيل مملوءة ، بينما الحالات في نطاق التوصيل فتكون فارغة ، أي أن شبه الموصِل يكون عازلاً . ولكن ، ومع ارتفاع درجة الحرارة ، تستطيع الالكترونات أن تثار حرارياً وتعبر الفجوة الطاقوية . وستكون مقاربةً معقولة إذا افترضنا أن الالكترونات المثارة تسلك في نطاق التوصيل سلوكاً شديد الشبه بسلوك

الالكترونات الحرة . واذا قسنا طاقات الالكترون ابتداء من قمة نطاق التوصيل ، فإن كثافة الحالات في نطاق التوصيل ستكون عندها مساويةً :

$$g(E)\,dE = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E - E_g)^{1/2}\,dE$$

ونظراً لأن الالكترونات في البلورة ليست حرة تماماً ، فانه يتوجب الاستعاضة عن كتلة الالكترون بـ « الكتلة الفعالة له ضمن البلورة m_e . أ) بفرض أن $(E - E_F) \gg kT$ ، احسب عدد الالكترونات المثارة حرارياً المنتقلة الى نطاق التوصيل تحت درجة الحرارة T ، وذلك بلغة الفجوة الطاقوية E_g وطاقة فيرمي E_F .

حين تتم إثارة الالكترون نحو نطاق التوصيل ، فانه يترك بعده « ثقباً » في نطاق التكافؤ . ويسلك هذا الثقب سلوك جسيم حرٍّ شحنته $(+e)$ وكتلته (الفعالة) m_h . ب) بفرض أن كثافة الحالات الثقبية تساوي

$$g(E)\,dE = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_h}{\hbar^2}\right)^{3/2}(-E)^{1/2}\,dE$$

(حيث الطاقة في قمة نطاق التكافؤ تساوي الصفر)، وأن $(E_F - E) \gg kT$ لأجل الحالات الطاقوية ضمن نطاق التكافؤ ، أوجدْ عدد الثقوب التوازني في ظل درجة الحرارة T ، وذلك بلغة E_F و E_g .

يساوي عدد الالكترونات في نطاق التوصيل ، وضمن شبه الموصِل النقي ، عدد الثقوب في نطاق التكافؤ . ج) استخدم كلاً من هذا الشرط والنتائج السابقة لتحديد طاقة فيرمي E_F بوصفها دالة للحرارة T . د) بيِّن أنه عندما $m_e = m_h$ ، فإن طاقة فيرمي في منتصف الفجوة الطاقوية ، أي أن $E_F = \frac{1}{2}E_g$.

6–18 يمكن عد الفوتونات بمثابة جسيمات تخضع لاحصائيات بوزيه ـ اينشتاين . استخلص قانون بلانك للاشعاع (1–4) مُستخدِماً المعادلة المشتقة في سياق النص لأجل العدد المتوسط للجسيمات (للفوتونات) في أية حالة طاقوية ، وذلك بالاجتماع مع المعادلة الواردة في الفصل الأول لأجل كثافة أنماط الاهتزاز الكهرمغنطيسي ضمن واحدة الحجم في حاوية . (**ملاحظة** : لقد تم وأثناء اشتقاق المعادلة الخاصة بـ $[n_i]$ في النص ، إدخال عامل لاغرانج ν بغية التقييد القاضي بأن يكون العدد

الاجمالي للجسيمات $\sum_i [n_i] = N$ ثابتاً . ولكن الفوتونات في حالة الاشعاع تُولد وتفنى ، بحيث أن حفظ العدد الاجمالي ليس الزامياً ، وفرض التقييد المذكور على حالة الفوتونات ممكن من خلال جعل $\nu = 0$.

18-7 استخدم شكلانية مصفوفة الكثافة لحساب القيمة المتوقعة للعزم المغنطيسي الخاص بجسيمات ذات برم 1/2 متموضعة في مجال ساكن ، وذلك عندما يؤثر مجال تذبذبي ضعيف قريب من الرنين في اتجاه معامد للمجال الساكن . ويمكن توصيف المجال التذبذبي بوساطة عنصرَيْ مصفوفة هاملتون $H_{12} = H_{21} = -\mu\mathcal{B}\cos\omega t$ ، حيث يشير الدليلان 1 و 2 الى حالتي البرم الطاقيتين ، العليا والدنيا ، غير المضطربتين ، أي $E_1 = \mu\mathcal{B}_0$ و $E_2 = -\mu\mathcal{B}_0$. وهنا ، تشير μ الى العزم المغنطيسي لكل برم ، أما $\mathcal{B}$ فهي مقدار المجال التذبذبي ، و $\mathcal{B}_0$ مقدار المجال الساكن ، و ω التردد الدائري للمجال التذبذبي .

ويجب أن نتذكر وعند دراستنا لمعادلة الحركة الخاصة بمركبات فردية من مصفوفة الكثافة ، أن آليات الاسترخاء تفعل فعلها . وإن العنصرين الاضطرابيَّيْن المشار اليهما أعلاه يتضمنان فقط تأثيرات المجال الكهرمغنطيسي الذي يؤثر في التجمع ، أي أن الحدود الخاصة بتأثير الاسترخاء غير موجودة ، وهذه الحدود تُحدِث تغييرات في مصفوفة الكثافة باتجاه اعادة هذه المصفوفة الى الشكل الذي يميز التوازن الحراري . ويُبقي تأثير عمليات الاسترخاء على ρ_{11} و ρ_{22} ثابتين (أي على القيمتين اللتين يمكن أن تتميزا عن قيمتي التوازن الحراري) وعليه يجب أن نجعل $\partial\rho_{22}/\partial t$ و $\partial\rho_{11}/\partial t$ مساويين الصفر . كذلك يتوجب ، وأثناء تقدير ρ_{12} ، تجاهل الحد غير الرنيني $1/(\omega + \omega_0)$ والحد الانتقالي $A\exp(-i\omega_0 t)$ ، حيث $\omega_0 = (E_1 - E_2)/\hbar$.

أ) بين أن مصفوفة الكثافة ، وضمن هذه التقريبات ، تتخذ الشكل التالي :

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \frac{1}{2}\frac{\mu\mathcal{B}}{\hbar}\frac{(\rho_{11} - \rho_{22})}{\omega_0 - \omega}\exp(-i\omega t) \\ \frac{1}{2}\frac{\mu\mathcal{B}}{\hbar}\frac{(\rho_{11} - \rho_{22})}{\omega_0 - \omega}\exp(i\omega t) & \rho_{22} \end{bmatrix}$$

(ونظراً للتقريبات التي أُجريَت ، يكشف العنصران غير القطريَّين عن شذوذ في نقطة

الرنين ، ولكن المعالجة الأكثر دقةً من شأنها أن تُسفر عن قيم نهائية لهما في حالة الرنين) ب) بالانطلاق من مصفوفة الكثافة هذه ومن مصفوفات باولي البرمية ، قدِّر القيم المتوقعة لأجل المركَّبات الثلاث للعزم المغنطيسي النقي الخاص بالتجمع .

18-8 بيِّن أن أثر المصفوفة الناتجة عن جداء مصفوفتين لايتوقف على تسلسل الجداء .

18-9 استخدم شكلانية مصفوفة الكثافة لحساب المتأثرية البرمية المغنطيسية المسايرة لدى غاز مثالي من الالكترونات . (تجاهل المفاعَلات بين الالكترونات).

18-10 يجرى في غاز من الالكترونات قياس على المركبة z من زخزم البرم الخاصة بنصف الالكترونات . احسب القيمة الأعظمية الممكنة بالنسبة لـ $[\sigma x]$.

18-11 تحتوي بلازما متدنية الكثافة على الكترونات ، برم كل منها مستقطب في الاتجاه x عندما $t = 0$. أ) اكتب مصفوفة الكثافة لأجل زخوم البرم الالكترونية ، وذلك بفرض أن مجالاً مغنطيسياً منتظماً يؤثر في البلازما في الاتجاه .
ب) بفرض أن آلية استرخاء الاصطدام موجودة ، كيف تتغير مصفوفة الكثافة مع الزمن ؟ جـ) كيف يتغير معلم اللاانتظام في المعادلة (18-37) مع الزمن ، (**توجيه** : في ظل استرخاء الاصطدام يكون مستقطباً كل الكترون يتعرض للتصادم).

18-12 احسب مصفوفة الكثافة التي تمثل تجمعاً من جسيمات ، حيث القيمة المتوسطة لمربع إحداثيها x يساوي مقدار a^2 .
(**ملحوظة** : يتوجب الافتراض بأن التجمع يتمتع ب**الانتظام** فقط بالقدر الذي يستدعيه الشرح الوارد أعلاه . لهذا يجب جعل معلم الانتظام في المعادلة (18-37) أعظمياً ضمن هذا الشرط .

18-13 أ) احسب مصفوفة الكثافة التي تمثل تجمعاً من جسيمات تساوي القيمتين المتوسطتين لـ x^2 و P_x^2 فيه المقداران b^2 و a^2 بالترتيب ، (انظر المسألة (18-12)). ب) بيِّن أن الجداء $a \cdot b$ يجب أن يتجاوز نطاقاً أدنى معيناً .

جـ) ماهو هذا النطاق ؟ د) ماذا تمثل المعادلة (18–37) عند هذا الحد الأدنى ؟ هـ) احسب σ بوصفها دالة لـ a.b .

18–14 سبق النقاش في المسألة (15–7) أن الحالة الدنيا للهيدروجين الذري تتشعب إلى حالتين للزخم الزاوي الاجمالي هما $F = 1$ ، $F = 0$ ، وذلك بسبب مفاعلة البنية مفرطة الدقة . ويساوي الزخم الزاوي الاجمالي هنا ما يلي :

$$F \equiv S + I$$

حيث : I زخم البرم الزاوي للبروتون ، و S هو برم الالكترون ($I = 1/2. S = 1/2$) يمكن كتابة حد المفاعلة البرمية ـ البرمية ضمن مؤثر هاملتون (الذي يؤدي إلى التشعب المذكور)، وفي الحالة الدنيا ، على الشكل

$\triangle E \, (F^2 - 2/3\, \hbar^2)/\, 2\hbar^2$ ، حيث $\triangle E = hv$

و $V = 1420$ مكرون / ثا .

تؤدي الاصطدامات بين ذرات الهيدروجين وبشكل عام ضمن غاز من هذه الذرات ، إلى تأثير تبديل الالكترون ، والتي من شأنها نقل الطاقة بحرية بين درجات الحرية الانتقالية والبرمية ، التي يمتلكها الغاز ، وخلال مثل هذه التبديلات للالكترونات ، يبقى زخم البرم الزاوي الاجمالي لدى الغاز دون تغيير . أ) احسب مصفوفة الكثافة لأجل حالات البرم الداخلية لدى غاز الهيدروجين ، والذي يفترض أنه يستقطب في لحظة البداية بوساطة مجال مغنطيسي يزال بعد ذلك على نحو فجائي . (توجيه : يتوجب معالجة ذرات الهيدروجين المفردة ، وعلى نحو تقريبي ، كأنها نظم حركية مستقلة تتفاعل مع خزان حراري درجة حرارته T). وينشأ التوازن الاحصائي الناتج ، بحيث يتخذ الزخم الزاوي المتوسط [F] القيمة التي تنجم عن الاستقطاب البدائي . فعندها تكتسب مصفوفة الكثافة شكلاً قانونياً ، ولكنه معدّل ، وذلك بسبب الشرط الاضافي القاضي بأن تكون القيمة المتوسطة لـ F محددة سلفاً).

ب) احسب القيم المتوسطة $[S_z]$ و$[I_z]$ و$[F^2]$. جـ) كيف تبدو تبعية طاقة البرم الداخلية لدى الغاز للمقدار $[F]^2$ ؟

جدول الثوابت الذرية

شحنة الالكترون (بالواحدة): $e = 4.80294 \pm 0.00008 \times 10^{-10}$

كتلة الالكترون (بالغرام): $m = 9.1086 \pm 0.0003 \times 10^{-28}$

كتلة البروتون (بالغرام): $M_p = 1.67245 \pm 0.00005 \times 10^{-24}$

سرعة الضوء (سم / ثا): $c = 2.997928 \pm 0.000004 \times 10^{10}$

ثابت بلانك (إرغ ـ ثا): $h = 6.6254 \pm 0.0002 \times 10^{-27}$

عدد أفوغادرو : $N_0 = 6.0247 \pm 0.0002 \times 10^{23}$

ثابت البنية الدقيقة : $\alpha = 7.29729 \pm 0.00003 \times 10^{-3}$

$\alpha^{-1} = 137.0371 \pm 0.0005$

ثابت بولتزمان (إرغ / $^{\circ}K$): $k = 1.38049 \pm 0.00005 \times 10^{-16}$

مغنطون بـور (إرغ /آيرستد): $\mu_0 = 9.2733 \pm 0.0002 \times 10^{-21}$

ثابت رايدبرغ (الكترون فولت): $R_\infty = 13.6050$ ev

ثابت ستيفان ـ بولتزمان (إرغ / سم^2 ـ ثا ـ $^{\circ}K^4$)

$\sigma = 5.6696 \pm 0.0004 \times 10^{-5}$

نصف قطر بـور لذرة الهيدروجين (سم):

$a_0 = 5.29173 \pm 0.00002 \times 10^{-9}$

طول موجة كومبتون للالكترون (سم):

$\lambda_e = \hbar/mc = \alpha a_0 = 3.86153 \pm 0.00004 \times 10^{-11}$

نصف القطر « الكلاسيكي » للالكترون (سم):

$$r_0 = e^2/mc^2 = \alpha\lambda_c = 2.8179 \pm 0.0002 \times 10^{-13}$$

طاقة السكون للالكترون (ميغا الكترون فولت): $mc^2 = 0.511$

طاقة السكون للبروتون (ميغا الكترون فولت) : $M_p c^2 = 931$

طاقة التأين لذرة الهيدروجين (الكترون فولت): $I_0(\mathrm{H}) = 13.55$

المحتويـــات